



UNIVERSIDAD CARLOS III DE MADRID

Tesis doctorales

Ciencia e Ing. Materiales e Ing. Qca

**Propiedades físicas de grafeno en
presencia
de desorden topológico**

AUTOR: Alberto Cortiio Fernández

biblioteca



Va por ti, Suzana



Propiedades físicas de grafeno con desorden topológico.

Una Tesis presentada
por

Alberto Cortijo Fernández

al

Departamento de Ciencia e Ingeniería de Materiales e Ingeniería Química
como requerimiento para la obtención
del grado de
Doctor en Ciencias

Físicas

Universidad Carlos III de Madrid
Leganés, Madrid
Octubre 2007

Propiedades físicas de grafeno con desorden topológico.

Resumen

El grafeno es un cristal bidimensional consistente en una red hexagonal de átomos de carbono. Su estructura de bandas a baja energía y en situación de medio llenado viene descrita por la ecuación de Dirac sin masa en $(2+1)$ dimensiones. Este hecho hace que gran parte de las propiedades electrónicas y de transporte que presenta este sistema sean diferentes a aquellas que se encuentran en los semiconductores de baja dimensionalidad usuales.

En la realidad, las muestras de grafeno se encuentran curvadas. Las principales fuentes de curvatura son las fluctuaciones térmicas, los defectos topológicos y las interacciones con el sustrato. El hecho de encontrarse curvado hace que el grafeno presente modificaciones en sus propiedades físicas con respecto a la situación ideal.

En esta tesis proponemos un modelo de fermiones de Dirac en espacios curvos para modelizar estas desviaciones debidas a la curvatura en las propiedades electrónicas y de transporte del grafeno. Hemos calculado perturbativamente la densidad de estados local en presencia de defectos topológicos y en presencia de corrugaciones suaves. También hemos calculado la conductividad DC a nivel semiclásico en el grafeno curvado por defectos topológicos, encontrando un comportamiento de tipo difusivo, en contraste con la conductividad hallada para otros tipos de desorden estudiados en la literatura.

Por último, proponemos una forma alternativa a las expuestas hasta ahora en la literatura para la obtención de haces electrónicos polarizados en el índice de valle, por medio del uso de la distorsión trigonal en las bandas del grafeno. Este efecto de separación de haces puede observarse en uniones $n-p-n^-$ bajo unas condiciones accesibles experimentalmente. Por último, describiremos este mismo efecto en cristales fotónicos.

Tabla de Contenidos

Página de título	i
Resumen	iii
Tabla de Contenidos	iv
Citas a trabajo previamente publicado.	vi
Agradecimientos	vii
1 Estructura de la tesis.	1
2 Grafeno: un material verdaderamente bidimensional.	7
2.1 Las formas alótropas del carbono.	7
2.2 Estructura de la banda π en el grafeno. Aproximación de enlace apretado.	12
2.3 Modelo continuo de baja energía.	16
3 Fermiones de Dirac en grafeno con defectos topológicos.	20
3.1 Introducción. Defectos en membranas bidimensionales.	20
3.2 Defectos topológicos.	22
3.3 Efecto de una disclinación aislada.	25
3.4 Múltiples defectos. Limitaciones del modelo de campos gauge.	28
4 Teoría geométrica de los defectos topológicos.	33
4.1 Introducción. Corrugaciones en grafeno.	33
4.2 Ecuación de Dirac en espacios curvos.	36
4.3 Descripción de un número arbitrario de disclinaciones.	39
4.4 Densidad de estados.	42
4.5 Efecto de la curvatura suave en la estructura electrónica.	48
4.6 Conclusiones.	55
5 Desorden topológico y transporte en grafeno.	56
5.1 Introducción. Situación experimental.	56
5.2 El modelo.	59
5.3 Promedio sobre desorden.	61
5.4 Aproximación de campo medio. El modelo σ no lineal.	66
5.5 Conclusiones, problemas abiertos y trabajo futuro.	74

6	Formación de haces polarizados en el espín de valle en grafeno.	76
6.1	Introducción.	76
6.2	Distorsión trigonal, dispositivos y “valletrónica”.	78
6.3	Analogía óptica.	86
6.4	Conclusiones.	88
A	Teoría de la respuesta lineal.	91
A.1	El teorema de fluctuación-disipación.	91
A.2	La relación de Einstein.	93
	Bibliografía	95

Citas a trabajo previamente publicado.

Parte de los contenidos de esta tesis se basan en los siguientes artículos publicados o en fase de publicación:

- “*Electronic properties of curved graphene sheets*”
A. Cortijo y M. A. H. Vozmediano. Europhys. Lett. **77** (2007) 47002.
- “*Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene*”
A. Cortijo y M. A. H. Vozmediano. Nucl. Phys. **B 763** (2007) 293-308.
- “*Topological defects and electronic properties in graphene*”
A. Cortijo y M. A. H. Vozmediano. Proceedings of the 14th European Conference for Mathematics in Industry.
- “*A cosmological model for corrugated graphene sheets*”
A. Cortijo y M. A. H. Vozmediano. Eur. Phys. Jour. (ST) **148**. (2007) 83-89.
- “*Charge inhomogeneities due to smooth ripples in graphene sheets*”
F. de Juan, A. Cortijo y M. A. H. Vozmediano. Phys. Rev. B **76**,165409 (2007).
- “*Minimal conductivity of rippled graphene with topological disorder*”
A. Cortijo y M. A. H. Vozmediano. ArXiv:0709.2698 (2007).
- “*Valley polarized electronic beam splitting in graphene*”
J. L. Garcia-Pomar, A. Cortijo y M. Nieto-Vesperinas. arXiv:0710.1004 (2007).

Agradecimientos

El primer lugar en estos agradecimientos es para mi directora de tesis, María Ángeles Hernández Vozmediano. Geli confió en mí y me dio la oportunidad de empezar en este negocio que es la investigación. A lo largo de estos años no sólo me ha enseñado (mucha) física, sino que me ha brindado su amistad y me ha enseñado su manera de ver y hacer las cosas, de la que espero, por mi bien, haber aprendido. Gracias. He de agradecer a Geli su paciencia a la hora de revisar esta tesis. Te prometo que es el penúltimo dolor de cabeza que te doy.

En el ICMN he tenido la oportunidad de conocer e interactuar con grandes profesionales de la física, que junto con Geli, me han enseñado cómo funciona esta profesión. Agradezco enormemente haber aprendido de personas como Paco Guinea, Ramón Aguado, Pilar López Sancho y Luis Brey.

La línea de los agradecimientos profesionales y personales se diluye cuando hablo de personas como el propio Ramón, Leni, Luis, Rafa, Cesar, Simone, Tobías, Bernhard, Pablo, Elsa, Débora, Javi, Juan Luis, Fernando, David y tantos otros con los que he compartido buenos momentos durante todos los días en las comidas.

A Belén Valenzuela le agradezco especialmente haberme escuchado con paciencia en muchas ocasiones, y a Cesar Seoanez le agradezco, entre muchas cosas, su enorme habilidad con LaTeX.

Agradezco a todos los compañeros de despacho que he tenido: Débora, Javi, Fernando y David por hacer que el despacho fuera un sitio divertido en el que estar. A Débora se lo agradezco especialmente porque, gracias a ella, el despacho llegó a oler bien.

Tengo que agradecer aparte a Juan Luis García Pomar por su amistad ininterrumpida durante los años de la carrera y estos años de tesis. Las risas y las bromas diarias han fructificado, quién lo diría, en una colaboración profesional que espero que dure muchos años.

Todo lo que soy hoy y pueda llegar a ser algún día es gracias a mi familia. No hay forma alguna de agradecer lo suficiente el cariño y atención que me han dado. Gracias.

Mi último recuerdo en estos agradecimientos es para mi novia, Suzana. Conocerla ha supuesto un antes y un después en mi vida. Gracias por aguantar y aguantarme, pese a la distancia que nos separa. Esto va por ti, Suzana.

Capítulo 1

Estructura de la tesis.

El capítulo segundo consiste en una introducción al material llamado grafeno. Pondremos este material en el contexto de todas las formas alotrópicas del carbono. Revisaremos la manera en la que se modeliza la estructura electrónica de baja energía de este material a medio llenado, encontrando la muy interesante propiedad de que las excitaciones electrónicas a baja energía vienen descritas por la ecuación de Dirac sin masa en $(2+1)$ dimensiones. La dimensionalidad del sistema y la forma cónica de la relación de dispersión $E(\mathbf{k})$ se traducen en una densidad de estados que depende *linealmente* con la energía, siendo nula en los llamados puntos de Dirac (puntos en los cuales los vértices cónicos de las bandas de conducción y de valencia se tocan). La densidad de estados nula está en el corazón de la mayor parte de las propiedades anómalas que se observan en el grafeno. De entre todas esas propiedades anómalas desde el punto de vista de la teoría de semiconductores, la más interesante para nosotros será la respuesta que presenta el grafeno al desorden.

En el capítulo tres nos introducimos en el estudio principal de esta tesis: el estudio de la estructura electrónica del grafeno en presencia de desorden topológico. Como sabemos del capítulo anterior, el grafeno consiste en una lámina bidimensional de átomos de carbono dispuestos en estructura hexagonal. Un defecto topológico consiste en la introducción de un polígono de lado distinto a seis en dicha estructura hexagonal. Los defectos más comunes son los pentágonos y heptágonos (también conocidos como disclinaciones), o defectos compuestos, como dislocaciones (un par heptágono-pentágono) o los célebres defectos Stone-Wales (doble pareja de pentágonos y heptágonos).

Comenzaremos el capítulo respondiendo a la pregunta de si los cristales bidimensionales pueden existir. La respuesta es sí, gracias a la interacción entre los modos fonónicos flexurales y los modos fonónicos contenidos en el plano, pero pagando como precio el uso de la tercera dimensión, es decir, efectivamente, los cristales bidimensionales suspendidos son estables, pero presentarán fluctuaciones estructurales en forma de corrugaciones. Aparte, gracias a este doblado en la tercera dimensión, es posible argumentar que los defectos topológicos pueden existir, y por tanto, son una fuente

natural de curvatura para la lámina real de grafeno, junto con las propias fluctuaciones citadas antes.

Tras la discusión anterior, nos metemos de lleno en el estudio de las consecuencias que tienen estos defectos sobre la estructura electrónica. El primer modelo que vamos a considerar consiste en la consideración de las condiciones de contorno sobre las funciones de onda generadas por estos defectos. Veremos que estas condiciones de contorno se pueden transformar en tres potenciales gauge ficticios. El primero está relacionado con la frustración de las subredes que se produce al introducir un polígono de lado impar. El flujo “magnético” asociado a este campo es $\pi/2R_{\mathcal{P}}$, donde $R_{\mathcal{P}}$ es la matriz $\tau_2 \otimes \sigma_2$, la estructura peculiar de esta matriz tiene como consecuencia que los puntos de Dirac se mezclen. El segundo campo está relacionado con la falta o el exceso angular en el material producido al introducir un defecto. Los electrones en el grafeno son sensibles a dicho defecto o exceso de material, pudiendo entenderse este campo como una “modificación” en su momento angular, al estar asociado el flujo a la matriz $\tau_3 \otimes \sigma_3$ de rotaciones. El tercer campo gauge aparece cuando se consideran múltiples defectos, y su origen es la no conmutatividad de los operadores de transporte paralelo de la función de onda a lo largo de rotaciones en torno a cada defecto y de las traslaciones. El flujo magnético asociado puede tomar tres valores $\eta = 0, \pm 1/3$, en función de la disposición particular de los defectos. Debido a esta dependencia con la disposición concreta de los defectos, es posible encontrar situaciones en las cuales la contribución total sea nula, no apareciendo modificación alguna en las funciones de onda, lo cual resulta estar en contra con simulaciones realizadas al margen de este modelo.

En el capítulo cuarto presentaremos un modelo que generaliza y modifica convenientemente el modelo de campos gauge analizado en el capítulo anterior. Este modelo se basa en la apreciación de que realmente, los electrones se hayan en grafeno *curvado*. El modelo de espinores de Dirac en un espacio curvo fue aplicado con éxito en el estudio de la estructura de niveles electrónicos en la molécula de C_{60} y sus derivados. El fullereno, o molécula C_{60} , puede considerarse como una lámina de grafeno en el que se han introducido cinco defectos pentagonales, formándose una estructura esférica. La conjunción del modelo de fermiones en una esfera con la presencia del campo gauge que mezcla los puntos de Dirac da cuenta de forma muy aproximada de esta estructura de niveles. Estando la estructura de campos gauge bien entendida, en esta tesis analizamos de forma profunda el efecto que tiene la curvatura sobre la estructura electrónica. Para ello, resumimos la teoría de espinores en espacios curvos, introduciendo como herramientas las *díadas* y la *conexión de espín*. Las díadas constituyen un conjunto de vectores que forman un sistema de referencia localmente plano en cada punto de la superficie curvada. En tal sistema de referencia es posible construir representaciones espinoriales de las transformaciones de simetría tales como rotaciones o traslaciones. Debido a que este sistema de referencia es distinto en cada punto, es necesario modificar el concepto de derivada para poder definir correctamente una acción global.

El trabajo consiste en encontrar una métrica que describa la superficie curva, y tal métrica resulta ser bien conocida en cosmología, ya que los defectos topológicos son el análogo bidimensional a las cuerdas cósmicas en cuatro dimensiones. Estudiaremos configuraciones de defectos en las que de forma efectiva los campos gauge no geométricos (el primero y tercero de ellos explicados en el capítulo anterior). Veremos como podemos transformar el hamiltoniano de Dirac en espacio curvo en un hamiltoniano en el espacio plano en presencia de dos tipos de desorden: un campo gauge, que generaliza el campo gauge asociado a la matriz Σ , y, lo que es más interesante, una velocidad de Fermi dependiente de la posición generada por el desorden, término que no tiene análogo en el modelo de campos gauge y que, en cierto sentido, cura las limitaciones de este último modelo.

Hemos calculado perturbativamente la densidad de estados para varias disposiciones de defectos, encontrando modificaciones apreciables que pueden ser observadas experimentalmente. En concreto, en el caso de un defecto de tipo Stone-Wales, en el que el modelo de campos gauge no da alteración alguna a la densidad de estados, se aprecia una densidad de estados que puede ser comparada con simulaciones publicadas en trabajos anteriores.

Hemos mencionado que las muestras de grafeno curvadas, pueden estarlo tanto por la presencia de defectos topológicos o por las fluctuaciones térmicas inherentes a la fase plana de la lámina. Un tercer mecanismo que ocurre en las muestras depositadas sobre un sustrato. En tales situaciones, corrugaciones que no se encuentran suprimidas y las propias imperfecciones del sustrato pueden hacer que la muestra de grafeno se encuentre curvada de manera suave. Hemos aplicado el formalismo de espinores en espacios curvos a esta situación de curvatura suave, modelizada por una superficie con forma de gaussiana. Como en el caso anterior, encontramos modificaciones locales en la densidad de estados, con la salvedad de que la validez de tales modificaciones no se limitan a regiones concretas, al contrario que con los defectos, en donde las modificaciones perturbativas densidad de estados dejan de tener sentido.

La pregunta que motiva el capítulo quinto surge de forma natural. ¿Cuál es el efecto, no de un conjunto pequeño de defectos, sino de un conjunto muy grande de ellos? Este efecto se debe apreciar, no sobre magnitudes locales, como la densidad de estados local, sino sobre propiedades medidas a escalas macroscópicas, tales como la conductividad eléctrica. Antes de calcular esta magnitud, definiremos con precisión el modelo y la manera de calcular observables promediados sobre todas las posiciones de desorden.

En el capítulo anterior, vimos que el desorden topológico es un desorden de largo alcance. Esta cualidad se va a transmitir en el modelo de desorden, apareciendo en forma de una interacción de cuatro fermiones de tipo corriente-corriente. el parámetro de acoplo adimensional de dicha interacción $g(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ resulta ser divergente en el límite $\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}$. Otra característica de este modelo, que resultará ser clave, es la anisotropía de la función $g(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$. Descompondremos la interacción de cuatro fermiones en un conjunto infinito de canales angulares, de tal manera pasaremos de tener una

función g dependiente de los ángulos de dispersión de entrada y de salida a un conjunto de interacciones etiquetadas por un momento angular. La divergencia en el parámetro de acoplo hará que las propiedades a una partícula, tales como la vida media $1/2\tau$ o la densidad de estados al nivel de Fermi $\rho(\omega = 0)$ sean magnitudes divergentes. Daremos cuenta de tal divergencia introduciendo un parámetro adimensional δ , cuyo significado físico estaría relacionado con una distancia finita sobre la cual, los electrones serían insensibles a los defectos. De esta manera, las propiedades citadas anteriormente pasan a ser finitas pero dependientes de este parámetro, que es esencialmente incontrolable. Emplearemos como herramienta de trabajo la teoría de los modelos sigma no lineales. En esta formulación, se transforma el modelo de fermiones de Dirac en interacción a un modelo no lineal de matrices, cuyo significado físico es el de der los grados de libertad de difusión del sistema. En el caso concreto de una interacción de tipo corriente-corriente como la que aquí nos atañe, veremos que aparecen dos conjuntos de modos de difusión, que a orden árbol, no interaccionarán entre sí, generando dos posibles canales para la difusión.

Sin embargo, bajo las circunstancias de una densidad de estados y una vida media finitas, calcularemos la conductividad DC, σ_{DC} , a nivel semiclásico (Aproximación de Born Autoconsistente) encontrando que dicha magnitud es independiente del parámetro δ , estando pues bien definida. El motivo principal por el cual obtenemos una conductividad bien definida es la existencia de múltiples modos angulares para la interacción, que generarán acoplos extra en las acciones para los modos de difusión. Integrando los modos de difusión masivos, encontraremos que la constante de difusión se ve renormalizada de tal manera que podemos obtener una conductividad independiente del parámetro introducido para cancelar la divergencia.

Junto con la independencia con el parámetro δ , y lo que es más interesante, encontramos que la conductividad DC es dependiente de la densidad de desorden. Esta dependencia, que es propia de los sistemas difusivos, choca con gran parte de los resultados teóricos y experimentales encontrados en la literatura hasta ahora, los cuales evidencian un valor para la conductividad DC universal, similar al valor que presentaría el grafeno en ausencia total de desorden.

Al final del capítulo comentaremos los rangos de validez de la teoría semiclásica, rangos que se encuentran definidos en términos del parámetro δ . También comentaremos las posibles direcciones futuras de este trabajo.

El capítulo sexto no guarda relación directa con el trabajo anterior, versa sobre la posibilidad de obtener haces polarizados en el grado de libertad de valle empleando la distorsión trigonal que aparece a energías moderadas en las bandas π del grafeno.

La “valletrónica” es un término que acuñaron los autores de la referencia [1] al proponer que el grado de libertad de valle en grafeno (es decir, la estructura de doble cono en la relación de dispersión a baja energía) podía ser utilizada de la misma manera que el espín real para transportar información, tal y como ocurre en espintrónica. En general, la función de onda a baja energía para un electrón π en grafeno es una combinación lineal de las funciones de ondas en ambos conos,

apareciendo esta degeneración como un factor multiplicativo en la mayoría de las circunstancias. Sin embargo, es posible separar electrones procedentes de distintos conos o valles cuando se consideran geometrías especiales, tales como un contacto cuántico inmerso en una banda de espesor finito de grafeno. Esta geometría tiene el principal inconveniente de ser experimentalmente irrealizable a día de hoy, ya que este dispositivo necesita un tipo concreto de bordes (bordes zig-zag) que puedan contener modos cero, modos de energía cero responsables de generar un desequilibrio en la población de ambos conos y por tanto, de una corriente polarizada en el valle.

Nuestra propuesta es utilizar como dispositivo una unión $n - p - n^-$. Esta unión, fácilmente obtenible experimentalmente, consiste simplemente en una barrera de potencial. La novedad consiste en considerar en uno de los lados de la barrera un potencial tal que la distorsión trigonal de la banda sea apreciable. Esta distorsión, correspondiente a considerar el siguiente término en el desarrollo en serie de momentos de las bandas, hace que las superficies de energía constante, que en el caso de Dirac eran circunferencias perfectas, ahora posean forma triangular, rompiéndose la isotropía del medio, y lo que es más interesante, la anisotropía en cada cono es diferente. La transmisión de electrones a través del grafeno en estas condiciones de anisotropía selectiva entre valles hace que la corriente transmitida tome direcciones diferentes para cada valle, produciéndose un fenómeno de separación de haces polarizados en el valle, siendo la separación angular de ambos haces, en la circunstancia más favorable, de aproximadamente 20 grados.

El efecto de separación de haces no es el único que encontramos, ya que depende de la orientación relativa entre la barrera de potencial y la red. El otro efecto extremo, también consecuencia de la distinta forma de las superficies de energía constante, consiste en una colimación hacia delante de uno de los dos conos, y una dispersión angular del haz correspondiente al otro cono. Aunque cualitativamente la respuesta de cada cono en este caso sea muy diferente, al estar ligada a la curvatura de la superficie de Fermi, la diferencia de energías necesaria entre una parte de la barrera y la otra hace que la curvatura de la superficie de Fermi en la zona de distorsión trigonal sea lo suficientemente pequeña como para que esta diferencia de efectos no sea muy pronunciada.

En el capítulo primero mencionamos que la aproximación de Dirac empezaba a fallar y el efecto de distorsión trigonal empezaba a ser apreciable en torno a energías de 0.6eV. Los dispositivos experimentales disponibles hoy en día no son capaces de ir mucho más allá de esas energías. El principal motivo por el cual no se pueden obtener dopados a mayor energía es debido al espesor concreto del sustrato de SiO_2 , ya que su valor viene marcado por su contraste óptico con la lámina de grafeno, lo que hace que sea observable a través de un microscopio óptico. Existe, sin embargo, otro máximo en el contraste óptico correspondiente a un valor mucho menor del espesor del sustrato, lo cual permite alcanzar valores iguales y superiores al valor citado anteriormente para la energía, siendo posible entonces observar experimentalmente este fenómeno de polarización de valle.

Este fenómeno de polarización de valle, aunque espectacular, no es exclusivo del grafeno. Ciertos cristales fotónicos (estructuras periódicas de materiales con distinto índice de refracción) tienen en su estructura de bandas conos similares a los conos de Dirac, e igualmente, zonas de energía mayor análogas a las zonas de distorsión trigonal en las bandas del grafeno. Al final del capítulo presentaremos simulaciones numéricas en cristales fotónicos de los dos efectos descritos anteriormente, simulando la unión $p - n^-$ por medio de la unión de dos materiales con índices de refracción diferentes. La ventaja actual en los cristales fotónicos es que este tipo de dispositivos experimentales ya son de uso común en los laboratorios de óptica.

Capítulo 2

Grafeno: un material verdaderamente bidimensional.

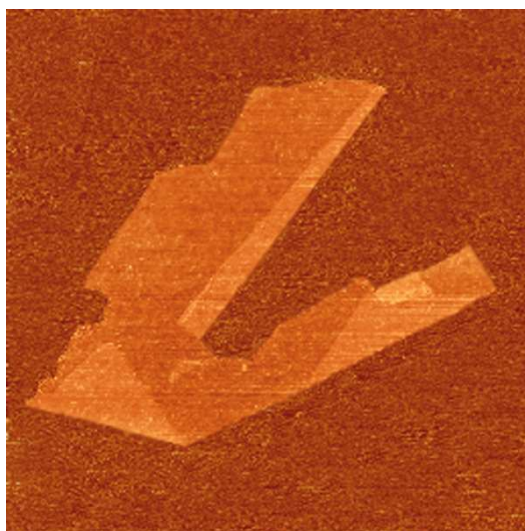


Figura 2.1: Imagen de una muestra de grafeno tomada mediante la técnica de microscopía de fuerzas atómicas. La lámina de grafeno es de un átomo de espesor y de aproximadamente 10 micras de longitud en ambas direcciones, conteniendo la muestra del orden de billones de átomos de carbono.

2.1 Las formas alótropas del carbono.

El átomo de carbono tiene una estructura electrónica $1s^2 2s^2 2p^2$. Esta estructura electrónica confiere al carbono la capacidad de conectarse entre sí de múltiples maneras y formar una variedad considerable de sólidos, tanto moleculares como cristalinos,

por medio del proceso de *hibridación*. Los tres tipos principales de hibridación del carbono dan lugar a materiales diferentes: si en la hibridación participa un electrón en el orbital $2s$ y un electrón en el orbital $2p$, la hibridación es de tipo sp^1 , y se generan estructuras moleculares cuyo miembro más simple es el acetileno (C_2H_2). El papel que desempeñan cada uno de los orbitales en esta hibridación es diferente: el orbital hibridado σ es el que confiere estabilidad estructural a la molécula uniendo los átomos de carbono, mientras que el resto de orbitales p , son perpendiculares al orbital σ se encuentran débilmente ligados. Las cadenas generadas por los átomos de carbono unidos por orbitales σ pueden ser tan largas como se desee, haciendo que el número de moléculas unidimensionales sea virtualmente infinito. La siguiente

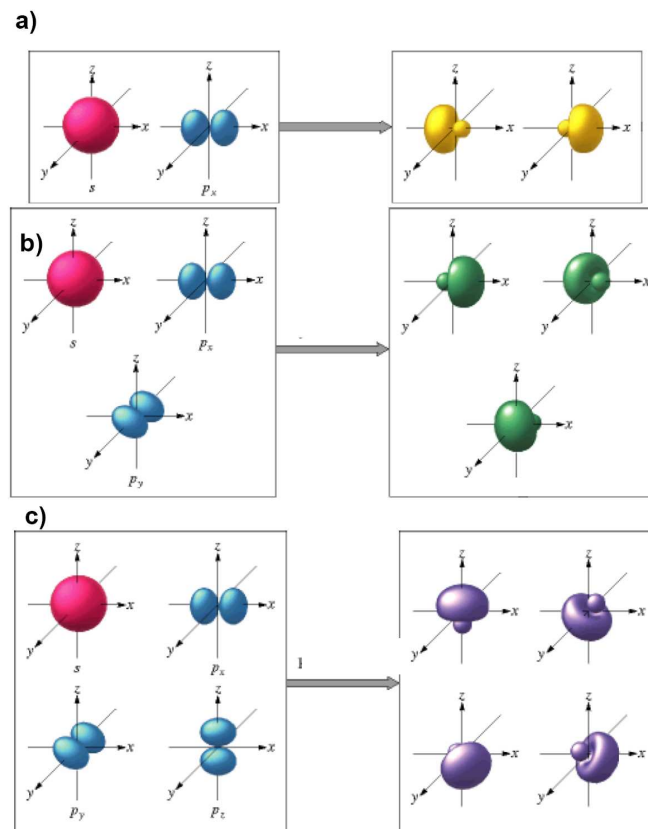


Figura 2.2: Los diferentes tipos de hibridación en el átomo de carbono: (a) Hibridación sp^1 . (b) y (c): Hibridaciones sp^2 y sp^3 .

estructura posible para el carbono procede del tipo de hibridación sp^2 . En este tipo de hibridación, el orbital atómico $2s$ se *mezcla* con dos orbitales $2p$ para generar tres orbitales moleculares σ , dispuestos en forma trigonal. La estructura generada es una

red de tipo hexagonal, conocida como *grafeno*. El orbital π restante es perpendicular a los orbitales σ , y, al igual que en el caso del acetileno, el electrón que se encuentra en dicho orbital está débilmente ligado y puede saltar de orbital a orbital, y será el responsable de las propiedades electrónicas de baja energía de este sistema.

Por último, la estructura restante procede de la hibridación del orbital $2s$ con los tres orbitales $2p$ (hibridación de tipo sp^3). Se generan cuatro orbitales σ dispuestos en estructura con forma de tetraedro. El sólido basado en el carbono con esta estructura es el diamante. Al contrario que las cadenas unidimensionales de tipo acetileno y la estructura bidimensional del grafeno, el diamante posee una estructura tridimensional, y puesto que no existen orbitales π deslocalizados, el diamante será (y es) un magnífico aislante.

El grafeno, a su vez, es la estructura generatriz de otros compuestos. Por ejemplo, la inclusión de 12 pentágonos en la red de grafeno produce una molécula cerrada, el fullereno o C_{60} , producido experimentalmente en 1985 por R. Curl, H. Kroto y R. Smalley. Otras estructuras derivadas del grafeno son los nanotubos, descubiertos en 1952 por Radushkevich y Lukyanovich, y más tarde, en 1991, redescubiertos para la ciencia occidental por S. Iijima,. Un nanotubo no es más que una lámina finita de grafeno enrollada sobre sí misma formando un cilindro. La libertad a la hora de enrollar la lámina de grafeno hace que existan toda una plétora de estas estructuras. Sin embargo, debido a la peculiar estructura de baja energía del grafeno, que veremos más adelante, y a las simetrías de la red hexagonal, los nanotubos puede pertenecer a dos grupos: nanotubos metálicos y semiconductores. En teoría, los nanotubos metálicos pueden soportar corrientes eléctricas muy superiores a las soportadas por metales convencionales como el cobre o la plata, lo que los hace muy interesantes para la posible fabricación de dispositivos. Por último, el grafito, que es la estructura

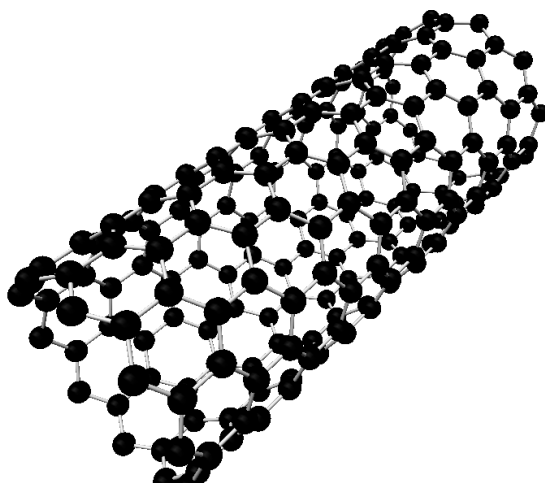


Figura 2.3: Imagen de un nanotubo.

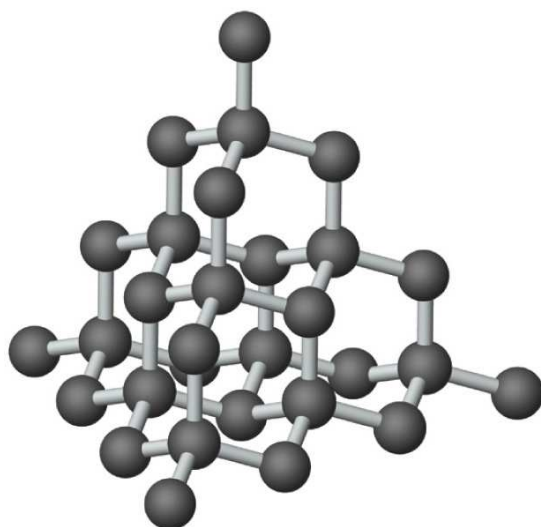


Figura 2.4: Imagen de la estructura atómica del diamante.

derivada del grafeno conocida desde hace más tiempo, está formado por una multitud de láminas de grafeno depositadas en forma de estratos unas sobre otras, y unidas entre sí por fuerzas de Van der Waals. No disponemos de espacio suficiente en esta tesis para enumerar y comentar todas las propiedades térmicas, mecánicas y eléctricas de los distintos tipos de alótropos del grafeno, la gran mayoría documentadas y entendidas desde hace años, así como de todos los usos, tanto reales como potenciales que tuvieren. Es curioso cómo el grafeno, siendo la estructura madre de tantas formas de carbono, ha sido la última en sintetizarse. El motivo principal por el cual el grafeno tardó en obtenerse experimentalmente es que simplemente no se creía que pudiera existir en la realidad como una estructura bidimensional.

El argumento fundamental que reside detrás de tal creencia se debe a L. Landau y R. Peierls, que demostraron que en un cristal estrictamente bidimensional, el valor medio de las fluctuaciones térmicas de los fonones escalan logarítmicamente con el tamaño de la muestra, divergiendo en el límite termodinámico, lo cual implica que el cristal bidimensional simplemente se desintegraría. Más tarde, Mermin, Wagner y Hohenberg extenderían este resultado a sistemas bidimensionales más generales estableciendo que no existe orden de largo alcance en dos dimensiones. No obstante, desde hace casi veinte años se sabe teóricamente que, en realidad, los cristales bidimensionales pueden existir en la realidad. El motivo, que veremos de forma detallada en el capítulo siguiente, es que las oscilaciones en la tercera dimensión pueden acoplarse a las oscilaciones en la superficie definida por el cristal, aniquilando las fluctuaciones divergentes y, por tanto, estabilizando el cristal bidimensional. Pese a todo, el cristal no se encontrará en una situación completamente plana, apareciendo corrugaciones y defectos, tal y como se observa experimentalmente hoy en día.

A título informativo, comentemos brevemente el método que se empleó original-

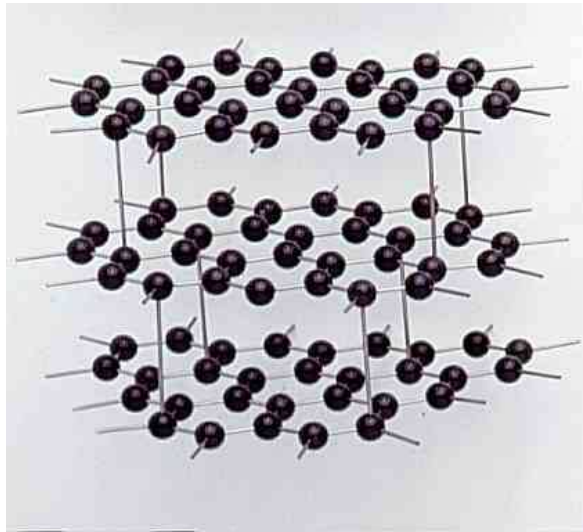


Figura 2.5: Imagen de la estructura estratificada en el grafito.

mente para aislar y caracterizar láminas de grafeno. El método de obtención no es realmente complicado, y consiste en depositar y separar un cristal de grafito sobre un sustrato hasta obtener capas cada vez más finas de grafito, apareciendo en algunos casos capas de grafito de espesor de un átomo. El principal problema consiste ahora en la identificación de monocapas[2] frente a otros fragmentos de grafito de mucho mayor espesor. Las técnicas de imagen como la microscopía de efecto túnel no dan información sobre el número de capas de las muestras. El elemento clave para la identificación de monocapas es que el grafeno de espesor monoatómico resulta ser visible cuando se deposita sobre un sustrato de SiO_2 de un espesor determinado[3]. Incluso, esta técnica resulta ser muy sensible, ya que una variación del 5% en el espesor de la parte de sustrato de SiO_2 haría que la muestra fuera invisible. En el último capítulo de esta tesis, encontraremos que, con objeto de poder acceder a energías donde el término de distorsión trigonal es relevante, es necesario variar el espesor de dicho sustrato de dióxido de silicio. Afortunadamente, el máximo en el contraste necesario para detectar monocapas de grafeno no es único, pudiéndose jugar con varios espesores. Además, con el tiempo han aparecido otras técnicas complementarias a la microscopía óptica para determinar el número de capas en una muestra de grafeno, tales como la microscopía Raman o el efecto Hall cuántico.

Curiosamente, el grafeno no es el único cristal bidimensional que se ha obtenido experimentalmente[4]. Empleando el método de exfoliación de cristales, se han obtenido cristales bidimensionales de nitruro de boro (BN), seleniuro de niobio ($NbSe_2$), sulfuro de molibdeno (MoS_2) y monocapas de superconductores de alta temperatura ($Bi_2Sr_2CaCu_2O_x$) abriendo la puerta al posible estudio experimental y teórico de sistemas bidimensionales.

El grafeno es un material estrella hoy en día en Materia Condensada, gracias a sus múltiples facetas. Por un lado, representa un material cristalino bidimensional, lo cual lo hace muy atractivo para la comunidad de física estadística, al compartir teóricamente muchas propiedades estadísticas con las membranas bidimensionales[5, 6]. Como veremos a continuación, la estructura electrónica de baja energía del grafeno viene descrita por la ecuación de Dirac sin masa, lo que abre las puertas a todo un campo de estudio consistente en la implementación de la Electrodinámica Cuántica en (2+1) dimensiones en un sistema de materia condensada[7, 8, 9, 10, 11]. Fonones y espectroscopía Raman[12, 13] y efecto Hall cuántico anómalo en grafeno y la bicapa de grafeno[14, 15, 16] son otros de los efectos interesantes, distintos a los estudiados hasta ahora en semiconductores convencionales. Estos fenómenos físicos nuevos y fascinantes han atraído la atención de los investigadores del campo. Mención aparte merecen las propiedades anómalas de transporte que presenta este sistema, que se estudiarán en el capítulo quinto de esta tesis.

2.2 Estructura de la banda π en el grafeno. Aproximación de enlace apretado.

Como hemos dicho antes, la hibridación sp^2 en los átomos de carbono genera una estructura bidimensional hexagonal, tal y como se ve en la figura (2.6). La estruc-

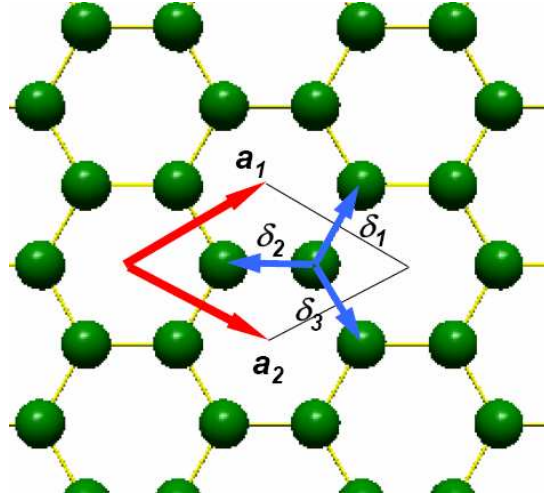


Figura 2.6: Imagen de la estructura hexagonal, característica del grafeno. Los vectores de la red directa son $\mathbf{a}_1 = \sqrt{3}a \left(\frac{3}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2} \right)$ y $\mathbf{a}_2 = \sqrt{3}a \left(\frac{3}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2} \right)$.

tura cristalina hexagonal puede entenderse como una superposición de dos subredes triangulares interconectadas, esto hace que la red hexagonal no sea una auténtica red de Bravais, y que la celda unidad en el espacio real esté constituida por dos átomos

pertenecientes a distintas subredes, separados una distancia $a \approx 1.42\text{\AA}$. En la figura (2.6) se muestran los vectores de traslación \mathbf{a}_1 y \mathbf{a}_2 para la red de grafeno, mientras que los vectores $\delta_{1,2,3}$ representan los vectores a los primeros vecinos. Los primeros vecinos del átomo de la otra subred son simplemente $-\delta_{1,2,3}$.

Vamos a calcular la estructura de bandas para los orbitales π en aproximación de enlace apretado[17], a primeros vecinos, para una lámina de grafeno perfecta e infinita. En tal aproximación, un electrón situado en una celda unidad viene descrita por la siguiente función de onda, en virtud del teorema de Bloch:

$$\Psi(\mathbf{K}, \mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_m^{A,B} \sum_{j_m}^N C_m e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_{j_m}} \phi_{A,B}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j_m}) \equiv \sum_m^{A,B} C_m \Phi_m(\mathbf{K}, \mathbf{r}). \quad (2.1)$$

En la función de onda (2.1), el índice $m = A, B$ representa cada una de las dos subredes, el índice j_m recorre todas las posiciones \mathbf{R}_{j_m} de los átomos de cada subred m en todo el cristal y $\phi_{A,B}(\mathbf{r})$ es la función de ondas del orbital p en cada átomo normalizada. El vector \mathbf{K} se encuentra cuantizado típicamente en unidades de $\frac{2\pi}{Na}$. Conocido el ordenamiento de los átomos de carbono en la red hexagonal y las funciones de onda atómicas para los orbitales p , el problema consiste en calcular los coeficientes C_m de tal forma que la función de onda (2.1) sea un autoestado del hamiltoniano

$$H(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2m_e} \nabla^2 + V(\mathbf{r}), \quad (2.2)$$

con la propiedad de periodicidad de la red del potencial V , $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$:

$$H(\mathbf{r})\Psi(\mathbf{K}, \mathbf{r}) = E(\mathbf{k})\Psi(\mathbf{K}, \mathbf{r}). \quad (2.3)$$

Multiplicando la ecuación (2.3) por $\Psi^*(\mathbf{K}, \mathbf{r})$ e integrando en \mathbf{r} , tenemos que

$$\begin{aligned} & \sum_{j_m, i_n}^N \sum_{n,m}^{A,B} \frac{1}{N} C_n^* C_m e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_{j_m} - \mathbf{R}_{i_n})} \int d^2\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i_n}) H(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j_m}) = \\ & = E \sum_{j_m, i_n}^N \sum_{n,m}^{A,B} \frac{1}{N} C_n^* C_m e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_{j_m} - \mathbf{R}_{i_n})} \int d^2\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i_n}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j_m}). \end{aligned} \quad (2.4)$$

En este punto, consideraremos la aproximación basada en suponer que la integral en el lado derecho de (2.4) es no nula únicamente cuando $i_n = j_m$ (solapamiento débil entre estados en distintas subredes), de tal forma que podamos escribir

$$\frac{E}{N} \sum_{j_m, i_n}^N \sum_{n,m}^{A,B} e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_{j_m} - \mathbf{R}_{i_n})} C_n^* C_m \delta_{j_m, i_n} \delta_{nm} = E \sum_m^{A,B} C_m^* C_m. \quad (2.5)$$

Más adelante comentaremos las implicaciones que conlleva esta simplificación.

Centrámonos ahora en el lado derecho de la ecuación (2.4). Debemos notar que los vectores de traslación de ambas subredes se relacionan entre sí, para $i = j$, por

$$\mathbf{R}_{j_A} - \mathbf{R}_{j_B} = -\delta_2. \quad (2.6)$$

Esta relación resultará básica en lo que sigue.

La aproximación de enlace apretado a primeros vecinos implica que la integral

$$\int d^2\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i_n}) H \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j_m}) = \int d^2\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) H \phi(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_{j_m} - \mathbf{R}_{i_n})) \quad (2.7)$$

será distinta de cero en dos posibles casos, habiendo entonces dos contribuciones en el lado derecho de (2.4). El primer caso corresponde a la situación en la que $\mathbf{R}_{j_m} = \mathbf{R}_{i_n}$, reduciéndose entonces la integral (2.7) a $\epsilon_0 \equiv \int d^2\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) H \phi(\mathbf{r})$. El término que contribuirá al lado izquierdo tendrá la forma $\epsilon_0 \sum_m^{A,B} C_m^* C_m$.

A la segunda contribución, correspondiente a considerar primeros vecinos, $n \neq m$, le corresponderá una fase que puede escribirse en términos de los vectores \mathbf{R}_{i_n} de una misma base, usando la relación (2.6), como

$$\mathbf{R}_{j_m} - \mathbf{R}_{i_n} = \mathbf{R}_{j_m} - \mathbf{R}_{i_m} - \delta_2. \quad (2.8)$$

Ahora que tenemos ambas sumas en la misma base, y debido a la invariancia de las funciones de onda bajo traslaciones de cualquier vector de la red real, se tiene que

$$\begin{aligned} & \sum_{n \neq m}^{A,B} \frac{1}{N} C_n^* C_m \sum_{j_m, i_m}^N e^{i\mathbf{K}(\mathbf{R}_{j_m} - \mathbf{R}_{i_m} - \delta_2)} \int d^2\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - (\mathbf{R}_{j_m} - \mathbf{R}_{i_m} - \delta_2)) = \\ & = \sum_{n \neq m}^{A,B} \frac{1}{N} C_n^* C_m N \sum_{j,i}^2 e^{i\mathbf{K}(\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j - \delta_2)} \int d^2\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - (\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j - \delta_2)). \end{aligned} \quad (2.9)$$

Ahora, simplemente, es suficiente con calcular $\mathbf{a}_i - \mathbf{a}_j - \delta_2$ para $i, j = 1, 2$, siendo el resultado de las posibles combinaciones para i y j los tres vectores $-\delta_{1,2,3}$. Dado que la integral $\int d^2\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - \delta_{1,2,3})$ no depende del vector δ concreto, por lo que definiremos el parámetro de *salto* t como $t \equiv \int d^2\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r} - \delta_{1,2,3})$ ($t \sim 2.8\text{eV}$). Finalmente, el correspondiente término en el lado izquierdo de la ecuación (2.4) queda de la siguiente forma:

$$t \sum_{n \neq m}^{A,B} C_n^* C_m \sum_j e^{-i\mathbf{K}\delta_j} \equiv t \sum_{n \neq m}^{A,B} C_n^* C_m f(\mathbf{K}). \quad (2.10)$$

Reuniendo todas las partes de la ecuación, podemos escribir (2.4) en forma de ecuación matricial:

$$\begin{pmatrix} \epsilon_0 & tf(\mathbf{K}) \\ tf^*(\mathbf{K}) & \epsilon_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \end{pmatrix}. \quad (2.11)$$

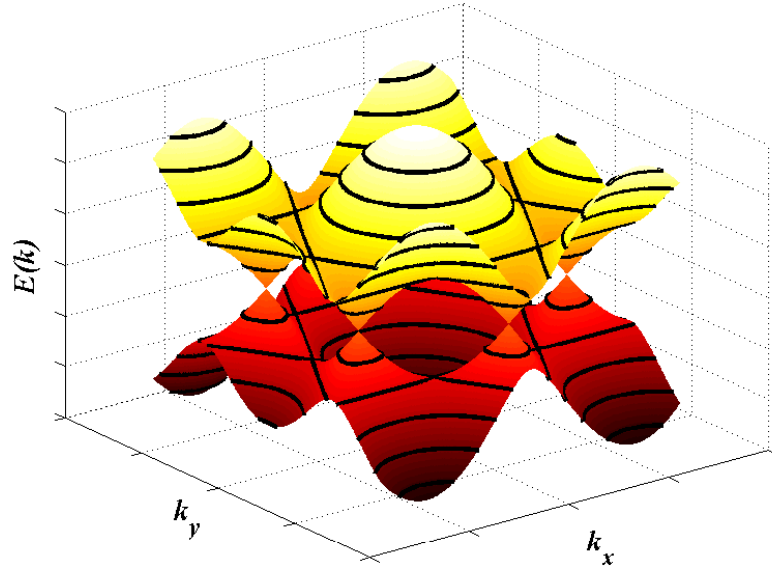


Figura 2.7: Estructura de las bandas π en el grafeno.

Las bandas, representadas por los autoestados de la ecuación de autovalores (2.11), son, empleando los valores explícitos de los vectores δ_j

$$E(\mathbf{k}) = \epsilon_0 \pm t \sqrt{1 + 4 \cos\left(\frac{3ak_x}{2}\right) \cos\left(\frac{\sqrt{3}ak_y}{2}\right) + 4 \cos^2\left(\frac{\sqrt{3}ak_y}{2}\right)}. \quad (2.12)$$

La estructura de bandas se muestra en la figura (2.7). En la práctica, el parámetro ϵ_0 puede eliminarse redefiniendo el origen de energías en la ecuación (2.11). La zona de Brillouin en el grafeno resulta tener forma hexagonal, hecho que puede anticiparse conociendo los vectores que definen la red recíproca, $\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} (1, \sqrt{3})$ y $\mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} (1, -\sqrt{3})$. Tal y como puede verse en la figura (2.8), las bandas de valencia y de conducción, representadas por las soluciones $E(\mathbf{k}) < 0$ y $E(\mathbf{k}) > 0$ respectivamente, se tocan en seis puntos, correspondientes a las esquinas de la zona de Brillouin. Por periodicidad de la red recíproca, el número de puntos independientes se reduce a dos: $\mathbf{K}_1 = \frac{1}{a} (0, \frac{4\pi}{3})$ y $\mathbf{K}_{-1} = \frac{1}{a} (0, -\frac{4\pi}{3})$. Este par de puntos, en los cuales las bandas se tocan se conocen como puntos de Dirac. Puesto que cada átomo de carbono cede un electrón del orbital $2p$ a las bandas, tendremos que la banda de valencia se encuentra totalmente llena y la de conducción totalmente vacía, situándose el nivel de Fermi, para el material neutro, justamente en los puntos de Dirac, y las excitaciones electrónicas a baja energía se encontrarán en el entorno de dichos puntos.

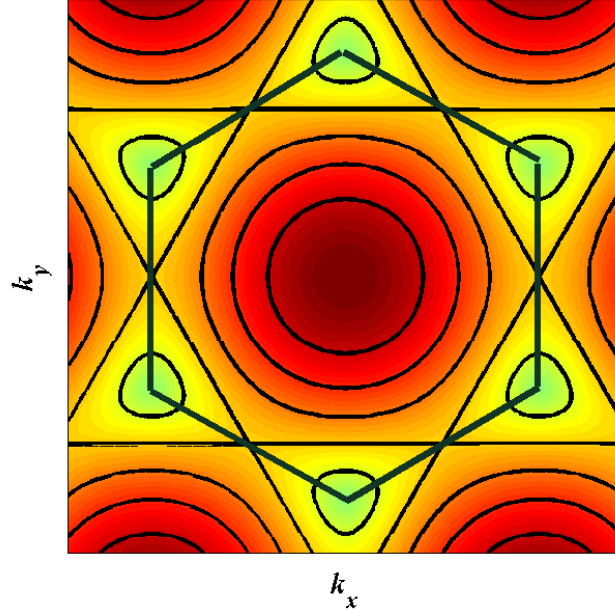


Figura 2.8: Estructura de las bandas π en el grafeno. La zona de Brillouin exagonal se muestra superpuesta.

2.3 Modelo continuo de baja energía.

Estos estados de baja energía, responsables de toda la física que se describirá en esta tesis, son, por lo tanto, aquellos que poseen un vector de ondas muy próximo a alguno de estos puntos, por lo que el hamiltoniano de baja energía que describa dichos estados puede obtenerse desarrollando en torno a los puntos de Dirac $\mathbf{K}_{1,-1}$ en la ecuación (2.11). Puesto que tenemos dos puntos de Dirac en torno a los cuales podemos desarrollar en serie, el resultado va a ser que, de forma efectiva, tenemos dos tipos de estados de baja energía, dependiendo de entorno a cual de los dos puntos de Dirac nos encontremos:

$$H = t \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{K}) \\ f^*(\mathbf{K}) & 0 \end{pmatrix} \simeq v_F \begin{pmatrix} 0 & sk_x - ik_y \\ sk_x + ik_y & 0 \end{pmatrix} + O(k^2), \quad (2.13)$$

en donde el parámetro $s \pm 1$ nos informa del punto de Dirac en torno al cual desarrollamos, y $v_F = \frac{3ta}{2}$ es un parámetro con dimensiones de velocidad, que tiene un valor muy aproximado de $v_F \sim 10^6 m/s$, y recibe el nombre de velocidad de Fermi. Podemos escribir la ecuación (2.13) de forma más compacta definiendo las matrices cuádrimensionales γ a partir de las matrices de Pauli σ y τ :

$$\gamma^1 = \tau_3 \otimes \sigma^1, \quad \gamma^2 = \mathbf{1} \otimes \sigma^2, \quad (2.14)$$

quedando finalmente el hamiltoniano

$$H = v_F \boldsymbol{\gamma} \mathbf{k}, \quad (2.15)$$

que resulta ser formalmente el hamiltoniano de Dirac en dos dimensiones espaciales. Llegamos pues a la siguiente conclusión: los estados electrónicos de baja energía en las bandas π se pueden entender como estados que satisfacen la ecuación de Dirac sin masa, actuando la estructura de subred como un grado de libertad de espín. En la literatura sobre grafeno, es muy común llamar a dicho grado de libertad *pseudoespín* o *espín* AB , en referencia a la estructura de subredes de la red hexagonal.

Los coeficientes $C_m^{s\mathbf{K}}$ pueden escribirse en forma espinorial, que, en el caso de baja energía donde hemos encontrado que el hamiltoniano tiene la forma del hamiltoniano de Dirac, pueden escribirse como

$$\Psi_{\mathbf{k}}^{\lambda} \equiv \begin{pmatrix} C_A^{\mathbf{K}} \\ C_B^{\mathbf{K}} \\ C_A^{-\mathbf{K}} \\ C_B^{-\mathbf{K}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2}} \\ \lambda e^{i\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2}} \\ e^{i\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2}} \\ -\lambda e^{-i\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2}} \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

El parámetro $\lambda = \pm 1$ indica a qué banda nos estamos refiriendo, $\lambda = 1$ para la banda de conducción y $\lambda = -1$ para la banda de valencia, y el ángulo $\theta_{\mathbf{k}}$ es el ángulo del vector de onda $\mathbf{k} = k(\cos \theta_{\mathbf{k}}, \sin \theta_{\mathbf{k}})$.

Pasemos ahora a comentar las aproximaciones que hemos hecho en el modelo, que son básicamente dos: la primera está relacionada con el número de vecinos a los que permitimos que los electrones “salten”. Si incluimos por ejemplo, términos de salto a segundos vecinos, encontraremos un término en la ecuación 2.11 que conecta átomos de la misma subred, por el simple hecho de que todos los segundos vecinos de un átomo pertenecen a la misma subred que éste, y que tendrá estructura diagonal. Por otro lado, puesto que cada segundo vecino posee otro situado en su posición inversa, el desarrollo a bajos momentos de este término contendrá un término constante, que romperá la simetría entre la bandas de valencia y conducción (simetría electrón hueco) e incluirá un término cuadrático en \mathbf{k} , $E_{SN} = -\frac{9t'a^2}{4}|\mathbf{k}|^2$. El parámetro t' es la probabilidad de salto por unidad de tiempo a los segundos vecinos, y se estima que tiene un valor de $t' \simeq 0.1\text{eV}$. La inclusión de más vecinos en la aproximación de enlace apretado es posible, pero carece de interés práctico, puesto que a baja energía no aparecerán términos distintos a los que puedan aparecer al considerar primeros o segundos vecinos, y los términos que aparezcan irán acompañados de coeficientes análogos a t o t' , pero cuyo valor será totalmente despreciable frente a estos dos.

La segunda aproximación es la aproximación de solapamiento débil hecha en la ecuación (2.5), donde consideramos que la integral

$$\int d^2\mathbf{r} \phi^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{i_n}) \phi(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{j_m})$$

era nula salvo cuando $\mathbf{R}_{i_n} = \mathbf{R}_{j_m}$, es decir, en el propio átomo en cuestión. Podemos perfectamente considerar la posibilidad en la que dicha integral sea distinta de cero cuando los orbitales pertenezcan a átomos adyacentes, o más allá. La aproximación de ser no nula a átomos adyacentes conlleva modificar el lado derecho de la ecuación (2.11) por el término matricial

$$E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} 1 & \alpha f(\mathbf{K}) \\ \alpha \mathbf{K} & 1 \end{pmatrix},$$

tal y como se desprende sencillamente de la ecuación (2.4). El solape entre orbitales de átomos vecinos es α , y se ha estimado que tiene un valor en torno a 0.13. La relación de dispersión resultante,

$$E(\mathbf{k}) = \frac{\epsilon_0 \pm t|f(\mathbf{K})|}{1 \pm s|f(\mathbf{K})|},$$

como en el caso anterior, rompe la simetría electrón-hueco. También, como en el caso anterior, las modificaciones que conlleva esta aproximación solamente se ven a segundo orden en el desarrollo en serie de $f(\mathbf{k})$, siendo el término lineal en el vector de onda el mismo en todos los casos, y el descrito en la ecuación (2.15).

Como vemos, la ecuación de Dirac (2.15) resulta ser una ecuación de ondas de baja energía muy robusta frente a las aproximaciones que se hicieron para obtenerla (ya que, aunque no lo hayamos comentado antes, la forma de (2.15) está protegida por las simetrías de la red cristalina). Es posible ver en experimentos de fotoemisión resuelta en ángulo[18] en qué rango de energías es válida esta aproximación de Dirac. A simple vista, podemos estimar que la aproximación lineal en las bandas es válida hasta una energía del orden de 0.6 – 0.7 eV, energías en las que el término cuadrático, también llamado de distorsión trigonal, comienza a ser relevante. A lo largo de esta tesis, exceptuando el último capítulo, donde estudiaremos un efecto de la distorsión trigonal, vamos a considerar exclusivamente la aproximación de Dirac. El valor de la energía nos introduce una escala de distancias mínima para la cual la ecuación de Dirac describe la física de forma precisa. Escribiendo la velocidad de Fermi en unidades de Årmstrong y electron voltios ($v_F \sim 6.5 \text{ ÅeV}$), dicho valor mínimo es del orden de 11 Å, es decir, la ecuación de Dirac va a describir perfectamente los estados electrónicos en escalas que puedan ir desde miles de Årmstrongs a 10 ~ 11 Å, siendo entonces una magnífica aproximación para describir todos los efectos macroscópicos que deseemos estudiar.

En los capítulos siguientes vamos a estudiar la densidad de estados del grafeno en presencia de desorden topológico, por lo que es conveniente conocer la densidad de estados en el grafeno perfecto.

Se define la densidad de estados como el número de estados electrónicos por unidad de energía y unidad de volumen[19]:

$$\rho_0(\omega) = \int d^2\mathbf{k} \delta(\omega - E(\mathbf{k})). \quad (2.17)$$

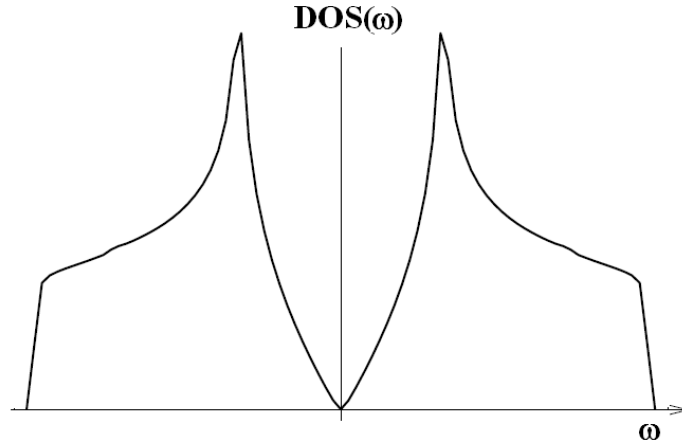


Figura 2.9: Densidad de estados en las bandas π de conducción y de valencia en grafeno. La densidad de estados en el nivel de Fermi $\omega = 0$ es nula.

En la figura (2.9) mostramos la densidad de estados para la relación de dispersión (2.12). El elemento más relevante a destacar de la densidad de estados en las bandas π es que es nula en el nivel de Fermi. Esta propiedad va a ser responsable o al menos estará involucrada en todas las propiedades anómalas que exhibe el grafeno, desde el punto de vista de la física de semiconductores. La aproximación de Dirac nos va a capturar correctamente la densidad de estados en torno al nivel de Fermi. Efectivamente, utilizando la aproximación $E(\mathbf{k}) = \pm v_F |\mathbf{k}|$ en (2.17), se encuentra fácilmente que la densidad de estados en la aproximación de Dirac es lineal con la energía:

$$\rho_0(\omega) = \frac{2}{\pi v_F^2} |\omega|. \quad (2.18)$$

En el lenguaje de segunda cuantización[20], la densidad de estados local es la parte imaginaria de la función de Green a dos puntos

$$\rho(\omega, \mathbf{r}) = \lim_{\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}} \text{Im} \text{Tr} \gamma^0 G(\omega, \mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (2.19)$$

Con la definición de la densidad de estados, finalizamos la descripción breve del grafeno y de su estructura electrónica a baja energía. En los siguientes capítulos, nos centraremos en el estudio de estas propiedades en presencia de desorden topológico.

Capítulo 3

Fermiones de Dirac en grafeno con defectos topológicos.

“Like human defects, those of crystals come in a seemingly endless variety, many dreary and depressing, and a few fascinating.” [19]

3.1 Introducción. Defectos en membranas bidimensionales.

En la vida real, los cristales tienen defectos que están presentes incluso en equilibrio térmico. En muestras reales de grafeno pueden encontrarse todo tipo de defectos: vacantes, defectos intersticiales, microroturas, átomos de otras especies, impurezas magnéticas y dislocaciones. Es bien conocida la importancia que tienen los defectos a la hora de entender las propiedades de transporte electrónico y las propiedades mecánicas de un material. En el caso del grafeno, el papel que puede jugar los defectos topológicos es incluso más interesante, al ser un material auténticamente bidimensional.

A continuación, revisaremos de forma breve el problema de una membrana cristalina bidimensional. Veremos que si se permite a esta membrana tanto deformarse como combarse, a temperaturas suficientemente bajas la membrana es capaz de estabilizarse en su fase plana [21, 22, 23].

Supongamos que la posición sobre la superficie de la membrana viene descrita por el vector tridimensional $\mathbf{u}(x, y) = (x, y, 0) + (u_1(x, y), u_2(x, y), f(x, y))$ como función de las coordenadas del plano (x, y) , por lo que las distancias sobre la superficie distorsionada verifican

$$d^2r = d^2r_0 + 2u_{ij}dx_id x_j. \quad (3.1)$$

El tensor u_{ij} está definido, en orden más bajo en gradientes de u_j y f , como

$$u_{ij} = \frac{1}{2} (\partial_i u_j + \partial_j u_i + \partial_i f \partial_j f). \quad (3.2)$$

Nótese el término anarmónico en (3.2), que acopla los modos $\partial_i u_j$ con $\partial_j f$.

En la teoría de la elasticidad, la energía necesaria para deformar la membrana es

$$E[u, f] = \frac{1}{2} \int d^2x \left(2\mu u_{ij}^2 + \lambda u_{kk}^2 \right) + \frac{1}{2} \hat{\kappa} \int d^2x (\nabla^2 f)^2. \quad (3.3)$$

Las constantes μ y λ son las constantes de Lamé de la membrana, y $\hat{\kappa}$ es la *rigidez de doblado* del material. El parámetro de orden que vamos a emplear para definir el orden cristalino es el vector normal a la membrana, $\mathbf{n}(\mathbf{r})$, relacionado con la función f a través de

$$\mathbf{n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{1 + |\nabla f|^2}} (-\partial_x f, -\partial_y f, 1). \quad (3.4)$$

El valor medio del vector \mathbf{n} puede calcularse a partir de (3.3) empleando toda la maquinaria de física estadística:

$$\langle \mathbf{n} \rangle = \int \mathcal{D}\mathbf{u} \mathcal{D}f \mathbf{n}(\mathbf{r}) e^{-\frac{E_b}{k_B T}}. \quad (3.5)$$

La ausencia de orden cristalino se da, como sabemos de física estadística, cuando las fluctuaciones en torno al valor medio (3.5) son lo suficientemente grandes, haciendo que la fase plana de la membrana sea inestable. Las fluctuaciones en torno a (3.5) pueden calcularse por medio del ángulo θ que forma \mathbf{n} con el vector normal al plano $\hat{\mathbf{z}}$ [24]: $\langle \theta^2 \rangle \simeq \langle |\nabla f|^2 \rangle$.

Puesto que $\mathbf{n}(\mathbf{r})$ es un funcional únicamente de la función f , podemos integrar los modos u_{ij} en la función de partición definida a partir de (3.3), obteniendo una energía libre efectiva

$$E_{eff} = \frac{1}{2} \hat{\kappa} \int d^2x (\nabla^2 f)^2 + \frac{1}{2} K \int d^2x \left(\frac{1}{2} (\partial_i f) (\delta_{ij} - \frac{\partial_i \partial_j}{\nabla^2}) (\partial_j f) \right)^2, \quad (3.6)$$

siendo K el módulo de Young bidimensional. El término no lineal en (3.6) hace que la rigidez de doblado deje de ser constante, pudiendo ser calculada como una serie de potencias del módulo de Young K . Pasando al espacio de momentos, es posible escribir una ecuación de autocosistencia para la rigidez de doblado renormalizada

$$\kappa_R(\mathbf{q}) = \kappa + k_B T K \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} \frac{q_i (\delta_{ij} - \frac{q_i q_j}{q^2}) q_j}{\kappa_R(\mathbf{k}) |\mathbf{q} + \mathbf{k}|^4}. \quad (3.7)$$

cuya solución es, en el límite de pequeños valores de q ,

$$\kappa_R(\mathbf{q}) \sim \sqrt{k_B T K} q^{-1}. \quad (3.8)$$

Las fluctuaciones $\langle \theta^2 \rangle$ tienen entonces la forma

$$\langle \theta^2 \rangle = k_B T \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{4\pi^2} \frac{1}{\kappa_R(\mathbf{q}) q^2} \simeq \sqrt{\frac{k_B T}{K}} \int \frac{d^2 \mathbf{q}}{4\pi^2} \frac{1}{q}. \quad (3.9)$$

La ecuación (3.9) es divergente únicamente en el ultravioleta, siendo *finita* en el infrarrojo. Puesto que estamos trabajando con membranas cristalinas, la divergencia ultravioleta se suprime imponiendo un valor máximo para el momento q del orden del inverso del espaciado de la red, $\Lambda \sim \frac{1}{a}$. Que las fluctuaciones (3.9) no sean divergentes infrarrojas significa que no son capaces de destruir la fase plana, al menos a temperaturas bajas (a temperaturas suficientemente altas, la entropía de la membrana cristalina favorece que ésta se arrugue, lo que sugiere una transición de fase desde la fase plana a la fase *arrugada*). El resumen de la discusión de los párrafos anteriores es que la combinación de los modos de deformación en la superficie, u_{ij} , con los modos fuera del plano o flexurales, f , hacen que la fase plana se estabilice a bajas temperaturas, permitiendo pequeñas fluctuaciones de la membrana, pero manteniéndose el orden cristalino. Por lo tanto, haciendo extensiva la discusión anterior al grafeno, podemos pensar que una lámina de grafeno suspendida tiene como fase estable, a bajas temperaturas, la fase plana.

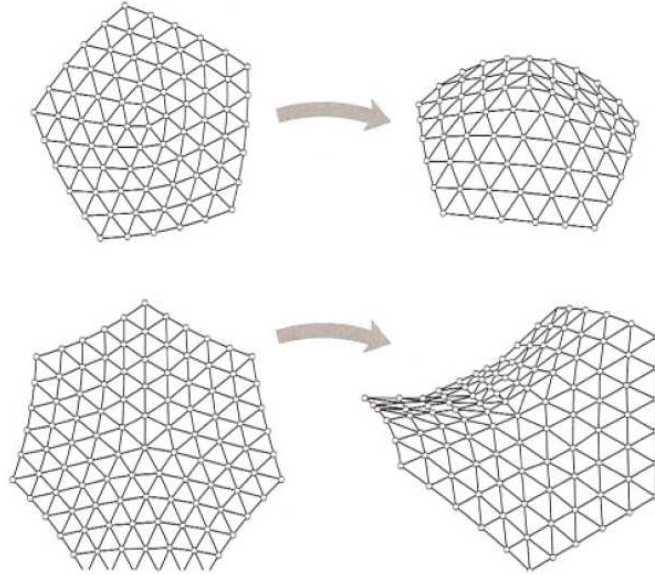


Figura 3.1: Defectos pentagonal y heptagonal en una membrana triangular. Se ha permitido que la membrana se curve en torno a los defectos en la tercera dimensión.

3.2 Defectos topológicos.

El análisis anterior nos sugiere que una muestra de grafeno libre puede mantenerse en su fase plana, permitiendo fluctuaciones sobre dicho estado que harían que la membrana se curvara localmente en regiones locales. Otra posible fuente de curvatura en la membrana de grafeno es la presencia de *defectos topológicos*: disclinaciones y

dislocaciones. Este tipo de defectos se al sustituir un anillo hexagonal por un polígono diferente.

En las figuras (3.1) y (3.2) se muestran imágenes de discliniaciones positiva y negativa y una dislocación, respectivamente. Una forma de construir una disclinación es por medio de la construcción de Volterra[25]: Supongamos una superficie cristalina bidimensional sobre la que retiramos o añadimos una sección angular de material. Uniendo los bordes obtenemos, o bien una superficie cónica, si hemos retirado mate-

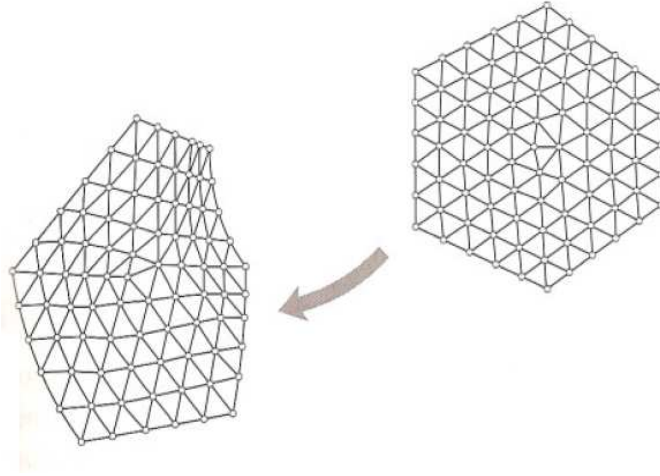


Figura 3.2: Par heptágono-pentágono curvado en la tercera dimensión.

rial, o bien una superficie hiperbólica, en el caso de añadir material a la superficie. Una dislocación puede entenderse como un defecto compuesto de dos discliniaciones cercanas. Las discliniaciones se caracterizan por el ángulo de material retirado o añadido $\theta(\mathbf{r})$, mientras que las dislocaciones vienen caracterizadas por su vector de Burgers $\mathbf{b}(\mathbf{r})$, que se define como el vector que une los núcleos de las discliniaciones que forman la dislocación. La característica fundamental que van a cumplir las discliniaciones está relacionada con el exceso o defecto angular antes citado: cuando se considera un circuito cerrado C que rodea la disclinación, el recorrido angular va a ser diferente al correspondiente para la lámina plana:

$$\oint_C d\theta(\mathbf{r}) = 1 - \frac{\beta}{2\pi} \equiv s \frac{2\pi}{6}. \quad (3.10)$$

Estos defectos juegan un papel fundamental en las transiciones de fase en sistemas bidimensionales[26, 27].

Al contrario que las ondas elásticas, que son excitaciones elementales de los campos u_{ij} y f , y que pueden excitarse con energías arbitrariamente pequeñas, los defectos topológicos se caracterizan por tener energías de formación *fijas*. A partir de las energías de deformación (3.3) o (3.6) podemos obtener las ecuaciones de movimiento para el campo f . Las ecuaciones extraídas de (3.3) son las ecuaciones de

von Karman[28], un conjunto de ecuaciones diferenciales en derivadas parciales no lineales. Estas ecuaciones pueden reducirse escribiéndolas en función de la función de tensión de Airy $\chi(\mathbf{r})$ y del campo $f(\mathbf{r})$, teniendo que cumplir las soluciones correspondientes a los defectos topológicos la condición (3.10). Una vez encontradas dichas soluciones, las energías elásticas para las disclinaciones pentagonal y heptagonal son $E_5 = \frac{\pi}{3}\kappa \ln(R/a)$ y $E_7 = \pi\kappa \ln(R/a)$. En estas dos expresiones vemos que las energías divergen con el tamaño de la muestra R , haciendo que la formación de disclinaciones aisladas en membranas de tamaño macroscópico sea muy costosa energéticamente. Sin embargo, éste no va a ser el caso de las dislocaciones.

En la figura (1.3) se muestra el valor de la energía asociada a un par heptágono-pentágono en unidades del módulo de Young K_0 como función de la coordenada radial R para varios valores del cociente entre K_0 y la *rigidez de doblado* $\tilde{\kappa}$. Salvo en el límite $K_0/\tilde{\kappa} \rightarrow 0$, correspondiente a la situación de lámina cristalina, en la que no son posibles las deformaciones, y que como sabemos, hace que $F \sim \log R$, la energía de formación tiende a un valor finito cuando $R \rightarrow \infty$. Este hecho genera un cambio profundo en la estadística de formación de defectos. En el umbral en el que las deformaciones locales de la red en torno a los defectos son posibles, la contribución entrópica domina a cualquier temperatura distinta de cero. La densidad de defectos es ahora finita:

$$n_D \approx a^{-2} e^{-F/(k_B T)}. \quad (3.11)$$

De la ecuación (3.11) podemos extraer la longitud de correlación translacional ξ_D :

$$\xi_D \approx n_D^{-1/2} \approx a e^{F/(2k_B T)}. \quad (3.12)$$

Esta relación nos dice que el orden traslacional estará roto hasta distancias iguales o mayores que ξ_D . La ecuación (3.11) también nos dice que la densidad de defectos compuestos por un par heptágono-pentágono será finita (al serlo F) a temperaturas finitas, en contraposición con lo que ocurre en el límite de lámina cristalina o en la situación de defectos aislados, en las que dicha densidad es nula en el límite $R \rightarrow 0$. En el caso del grafeno, el módulo de Young toma valores típicos del orden de 1000 GPa mientras que la rigidez de doblado κ es del orden de 1 eV en nanotubos[29]. Esto hace que, en unidades adecuadas, $\frac{K_0}{\tilde{\kappa}} \ll 1$, alcanzándose el valor asintótico constante rápidamente.

En base a toda la discusión anterior, es muy razonable pensar que los defectos topológicos son una fuente natural de desorden en el grafeno. A lo largo de lo que queda de capítulo y en los siguientes, veremos la manera profunda en la que la presencia de este desorden modifica la estructura electrónica de baja energía y las propiedades de transporte electrónico de una lámina de grafeno.

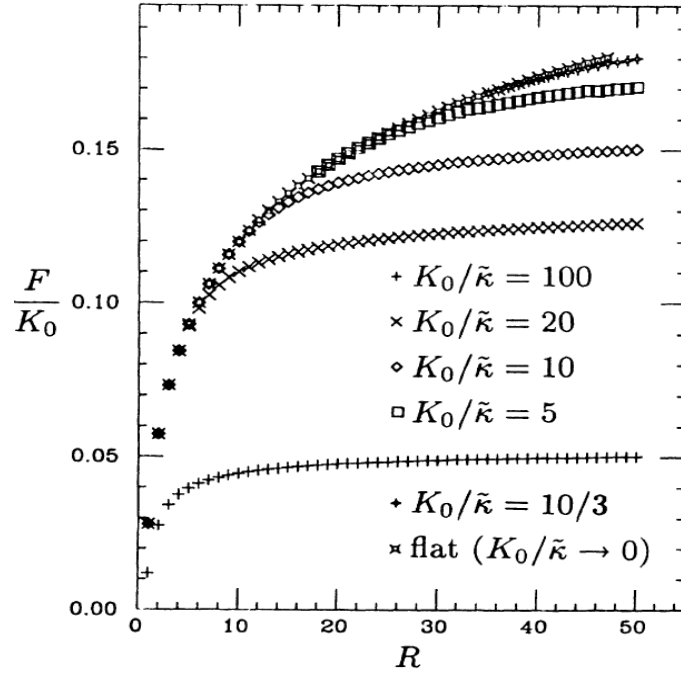


Figura 3.3: Energía de formación de un par heptágono pentágono para diferentes valores de las constantes de rigidez en el caso de una membrana de estructura cristalina *triangular*. En todos los casos la energía de formación tiende a un valor constante en el límite infinito de radio de la muestra R salvo en el límite inextensional. El par se encuentra separado a una distancia de uno, en unidades de espaciado de la red.

3.3 Efecto de una disclinación aislada.

Podemos construir un primer modelo para describir el efecto de una disclinación aislada en una lámina de grafeno, basándonos en la transformación de las condiciones de contorno que impone el cortado y pegado de la red tras la inclusión de un defecto en campos gauge. Esta transformación puede considerarse, de cierta manera, como el procedimiento inverso al efecto Aharonov-Bohm, en el que el efecto de un campo gauge se transformaba en una condición sobre las funciones de onda. Este modelo se propuso inicialmente para explicar el espectro discreto de baja energía de los fullerenos[9], y posteriormente para entender el efecto de dichos defectos en nanoconos de grafito[30, 31].

Cuando consideramos únicamente una disclinación aislada, el efecto de cortado y pegado de la red hexagonal va a generar dos condiciones de contorno no triviales sobre las funciones de onda. Como se muestra en la figura (3.3), la inclusión de un defecto puede entenderse fácilmente por medio de cortado y pegado. En el caso de un defecto pentagonal, se ha retirado un sector correspondiente a un ángulo de $\beta = \pi/3$, y posteriormente se han unido los átomos de los bordes. El primer efecto que genera

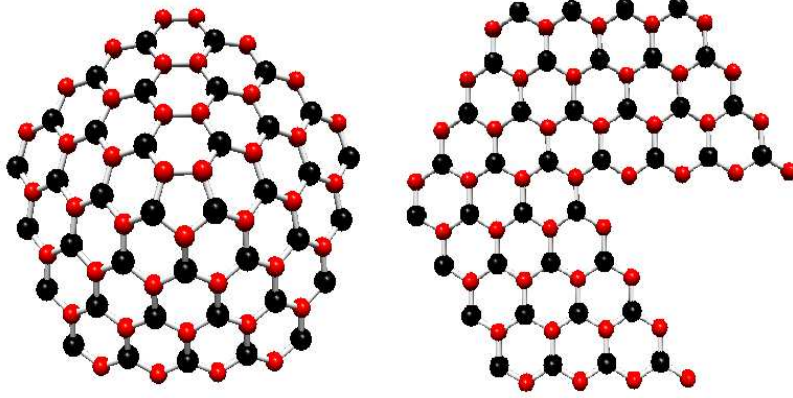


Figura 3.4: Izquierda: Efecto de un defecto pentagonal en la red de grafeno. Derecha: Procedimiento de corte y pegado de la red plana de grafeno para formar dicho defecto pentagonal.

una condición de contorno es que ahora el recorrido angular que, desde un punto de vista clásico, debería hacer un electrón al rodear el defecto, es menor que en la situación plana, exactamente el valor angular del sector retirado. Mientras que en la situación plana, la función de onda satisface la siguiente condición de contorno

$$\Psi(r, \theta) = -\Psi(r, \theta + 2\pi) = \exp(2\pi i \Sigma) \Psi(r, \theta), \quad (3.13)$$

siendo $\Sigma = \frac{1}{2}\tau_3 \otimes \sigma_3 = \frac{1}{2}\gamma^3$ el generador de rotaciones en torno al eje perpendicular a la lámina de grafeno, en el caso que nos ocupa, la anterior condición de contorno se modifica de forma trivial considerando como la nueva variable angular $\theta' = \theta(1 - \beta)$

$$\Psi(r, \theta') = \exp\left(2\pi\left(1 - \frac{\beta}{2\pi}\right)i\Sigma\right) \Psi(r, \theta'). \quad (3.14)$$

Es decir, aparece una condición de contorno extra con respecto a la situación plana en forma de $R_\Sigma = \exp(-i\frac{\beta}{2\pi}\Sigma)$.

La segunda condición de contorno es ligeramente más sutil. Cuando se incluye un defecto cuyo número de lados es impar, como es el caso de un pentágono o un heptágono, los átomos en los bordes y que ahora se encuentran enlazados pertenecen a la misma subred, mientras que, como ya sabemos, en la situación plana cada átomo se encuentra unido a átomos de la subred contraria.

Consideremos, para entender de manera más sencilla cómo describir este efecto como condición de contorno, la inclusión de un triángulo, tal y como se expone en la referencia [32], en ambas situaciones, como hemos dicho, la condición de contorno será la misma. En la figura (3.5) se muestra la situación y la equivalencia entre los átomos de ambos bordes. También se muestra como tras realizar dicha equivalencia,

un desplazamiento a lo largo de la costura aparece como una inversión, que genera el intercambio de las subredes. Esta inversión de la red tiene como consecuencias asociadas, en el espacio de momentos, el cambio del vector \mathbf{k} por $-\mathbf{k}$, y por tanto el intercambio de los puntos de Fermi, que satisfacen esa misma relación: $\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$. Por tanto, si consideramos que en $\theta = 0$ el espinor tiene estructura $\Psi = (\psi_{AK}, \psi_{BK}, \psi_{AK'}, \psi_{BK'})^T$, al realizar una rotación de ángulo π y cruzar la *costura*, el espinor tendrá la forma $\Psi^* = (\psi_{BK'}, \psi_{AK'}, \psi_{BK}, \psi_{AK})^T$. La forma matricial de la condición de contorno que cumple $R_P \Psi = i\Psi^*$ es

$$R_P = i \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ -\sigma_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.15)$$

El factor i se incluye en la condición de contorno para que se cumpla $R_P^2 = 1$, manteniendo la condición de contorno espinorial (3.13).

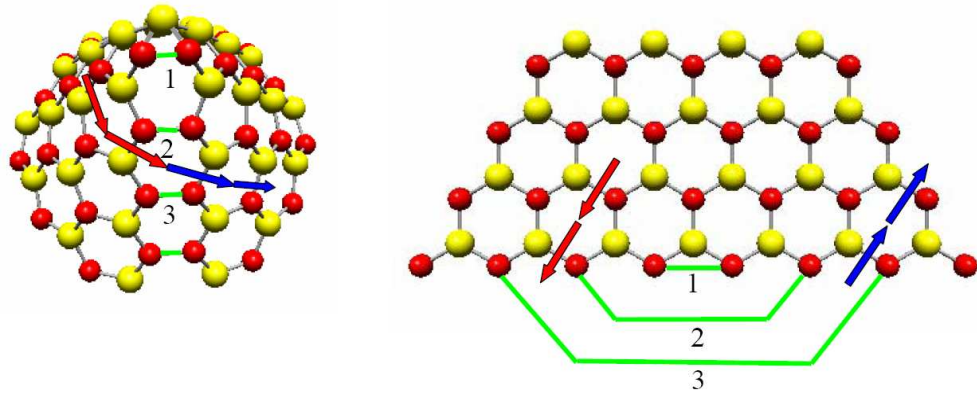


Figura 3.5: Defecto pentagonal de apertura $\beta = \pi$. En la figura de la izquierda se muestra una trayectoria *rectilínea* al cruzar la costura en términos de celda unidad de la red hexagonal. En la figura de la derecha se muestra la superficie cónica y la misma trayectoria. Se observa claramente la inversión efectiva de la red con respecto a la trayectoria al cruzar la costura. Esta inversión de la red es la responsable del intercambio efectivo de los puntos de Fermi, tal y como se explica en el texto.

Es fundamental notar que estas condiciones de contorno hacen que la función de onda electrónica sea discontinua en $\theta = 0$. Puesto que en la realidad, el proceso de cortado y pegado que genera las condiciones de contorno no es más que un artefacto ideado para analizar el efecto de estos defectos sobre funciones de onda, éstas no tienen por qué ser discontinuas, lo que motiva la conversión de dichas condiciones de contorno en campos gauge, los cuales sí permiten una transformación continua de la función de onda a lo largo de todo el espacio. Para tal fin, el primer paso es escribir

las condiciones de contorno en forma de exponenciales. En el caso de R_Σ el trabajo ya está hecho en la ecuación (3.14). Para $R_{\mathcal{P}}$ tenemos[9, 30, 33]

$$R_{\mathcal{P}} = i \exp \left(i \frac{2\pi}{4} \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ -\sigma_2 & 0 \end{pmatrix} \right). \quad (3.16)$$

Ahora podemos entender las condiciones de contorno de forma general como

$$\Psi(2\pi) = e^{iR_j} \Psi(\theta) = e^{i \oint \mathcal{A}_{R_j} d\mathbf{r}} \Psi(0), \quad (3.17)$$

donde queda definido un campo gauge no abeliano local $\mathcal{A}_{R_j}(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r})R_j = U_j^\dagger(\mathbf{r})\nabla U_j(\mathbf{r})$ asociado a cada condición de contorno. Por lo tanto, podemos escribir la función de onda general como

$$\Psi(\mathbf{r}) = e^{-i\Theta(\mathbf{r})} \Psi'(\mathbf{r}), \quad (3.18)$$

con $\Theta(\mathbf{r}) = \sum_{R_j} \int_{\mathbf{r}} \mathcal{A}_{R_j}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ y $\Psi'(\mathbf{r})$ una nueva función de onda que satisface la condición de contorno periódica para el grafeno plano (3.13).

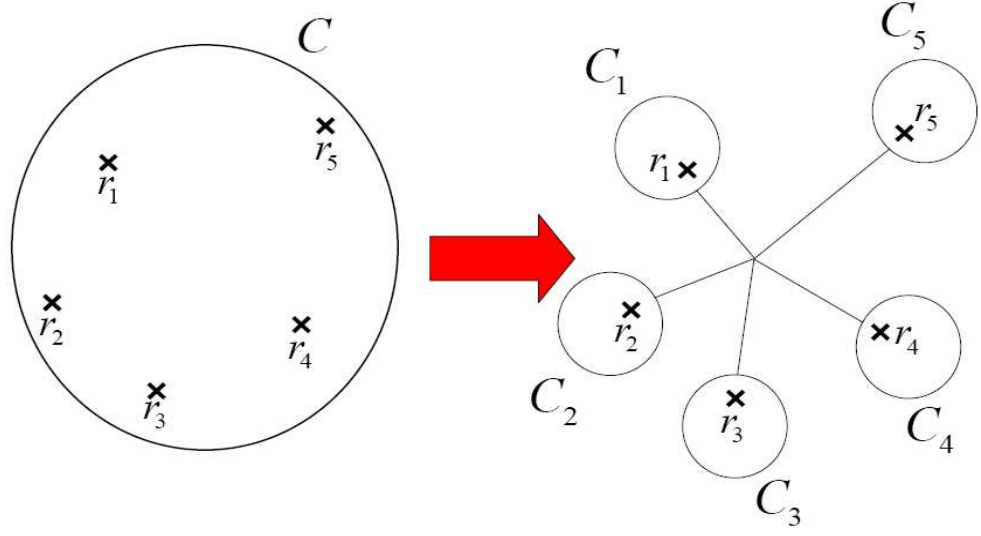
Podemos aplicar la propia transformación gauge al hamiltoniano de Dirac para obtener el hamiltoniano para $\Psi'(\mathbf{r})$:

$$H' = e^{-i\Theta(\mathbf{r})} H e^{i\Theta(\mathbf{r})} = i v_F \gamma^j \left(\partial_j - i \left(1 - \frac{\beta}{2\pi} \right) \Sigma \mathbf{A}_\Sigma(\mathbf{r}) - \frac{i}{4} R_{\mathcal{P}} \mathbf{A}_{R_{\mathcal{P}}}(\mathbf{r}) \right), \quad (3.19)$$

donde, recordemos, $\Sigma = \frac{1}{2}\tau_3 \otimes \sigma_3$ y $R_{\mathcal{P}} = -\tau_2 \otimes \sigma_2$. Podemos completar la transformación de las condiciones de contorno a los campos gauge definiendo los flujos ficticios asociados a cada campo gauge como $\Phi_\Sigma = \frac{\beta}{2\pi} = \frac{1}{6}$ y $\Phi_{R_{\mathcal{P}}} = \frac{1}{4}$, en caso de considerar un defecto pentagonal.

3.4 Múltiples defectos. Limitaciones del modelo de campos gauge.

Nuestro objetivo final es poder describir la situación en la que la muestra de grafeno contiene un numero arbitrario de defectos topológicos, repartidos de manera arbitraria por toda la muestra. La forma de extender el formalismo anterior al caso de múltiples defectos situados en posiciones arbitrarias es directa. Consideremos un punto al azar de la muestra como origen (al final veremos que el resultado es independiente de esta elección). Respecto a dicho centro, las posiciones de N defectos serán $\{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N\}$. Para ver cual es la condición de contorno no trivial inducida por los N defectos y, por tanto, el campo gauge ficticio asociado, consideraremos un circuito cerrado centrado en $\mathbf{r} = 0$ que englobe a todos los defectos y a lo largo del cual integraremos el campo gauge ficticio total que dé como resultado la condición de contorno deseada. La condición de contorno no debe depender de la forma concreta de dicho contorno, por lo que podemos deformarlo de tal manera que podamos

Figura 3.6: Deformación del contorno C .

aprovechar la discusión de los párrafos anteriores y entender la fase en función de las fases aisladas generadas por cada defecto.

Consideremos como ejemplo la deformación del circuito C propuesta en la figura (3.3). El contorno deformado consiste en traslaciones desde el punto tomado como origen hasta la posición de cada defecto, rotaciones en torno a cada defecto y de nuevo una traslación al punto de origen. El siguiente paso es ver cómo se transforman las funciones de onda por este camino deformado. En los párrafos anteriores hemos visto el caso de los desplazamientos a lo largo de caminos cerrados rodeando los defectos. Veamos ahora las traslaciones. El operador de traslación para la función de onda en aproximación de enlace fuerte es[31]

$$T(n, m) = \exp\left(\frac{2\pi}{3}i(n - m)\tau_3 \otimes 1\right). \quad (3.20)$$

La forma de (3.20) merece un comentario. Sabemos que la función de onda total para un electrón en grafeno, en aproximación de enlace apretado, es

$$\Psi_{total}(\mathbf{r}) = \sum_{j=A,B} \sum_{i=K,K'} \Psi_{ji}(\mathbf{r}) F_i(\mathbf{r}), \quad (3.21)$$

en donde $\Psi_{ji}(\mathbf{r}) \propto e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \Psi_{\mathbf{k}}$ son las funciones envolventes que satisfacen la ecuación de Dirac, y $F_i(\mathbf{r}) = \sum_l e^{i\mathbf{K}_i \cdot \mathbf{d}_l} \phi(\mathbf{r} - \mathbf{d}_l)$ son las funciones de onda de Bloch. Al aplicar una traslación \mathcal{T}_δ de recorrido, digamos, $\delta = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$, la función de onda $\Psi_{total}(\mathbf{r})$ se modificará con respecto a (3.21) de la siguiente manera:

$$\Psi_{total}(\mathbf{r} + \delta) = T(\delta) \Psi_{total}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\delta} e^{i\mathbf{K}_i \cdot \delta} \Psi_{total}(\mathbf{r}). \quad (3.22)$$

La fase $e^{\mathbf{k}\delta}$ es global a todas las componentes del espinor, siendo por tanto, en notación matricial, proporcional a la matriz identidad, y, tras completar el circuito deformado C , su contribución será nula. Sin embargo, en el caso de la fase $e^{\mathbf{K}_i\delta}$ la situación no va ser tan simple, ya que, empleando los valores concretos de los puntos \mathbf{K} y \mathbf{K}' en la misma notación *quiral* que δ , obtenemos (3.20). Por supuesto, al final del circuito C la contribución de la fase como función de δ debe ser nula, como en el caso anterior, pero vemos en (3.20) que $T(\delta)$ es proporcional a la matriz $1 \otimes \tau_3$, y por tanto, en la secuencia ordenada que constituye el circuito C :

$$C = \mathcal{T}(\mathbf{r}_1) \circ \mathcal{P}_1 \circ \mathcal{T}^{-1}(\mathbf{r}_1) \circ \dots \circ \mathcal{T}(\mathbf{r}_N) \circ \mathcal{P}_N \circ \mathcal{T}^{-1}(\mathbf{r}_N), \quad (3.23)$$

$T(\mathbf{r}_j)$ y $R_{\mathcal{P}_j}$ no conmutarán, al depender de las matrices $\tau_3 \otimes 1$ y $\sigma_2 \otimes \tau_2$ respectivamente. El operador asociado a la curva C entonces tiene la forma general, tras operar adecuadamente, asociando todas las fases de la misma naturaleza:

$$P_C = i(R_{\mathcal{P}_i})^N \exp(2\pi\beta i(N_5 - N_7)\Sigma) \exp\left(\frac{2\pi}{3}i \sum_j^N (n_j - m_j)\tau_3 \otimes 1\right), \quad (3.24)$$

expresión escrita en función del número de defectos pentagonales N_5 y heptagonales N_7 presentes en la muestra, y del numero total de ellos: $N = N_5 + N_7$. Los dos primeros términos de (3.24) son básicamente las fases ya descritas anteriormente. El tercer término corresponde a una nueva fase, cuyo origen es, como hemos visto, la no conmutatividad de los operadores de traslación y de rotación en torno a cada defecto[31]. El flujo magnético ficticio asociado a este tercer campo puede leerse directamente de (3.24), $\Phi_3 = \frac{1}{3} \sum_j^N (n_j - m_j)$. Esta suma da lugar a tres posibles valores *módulo* 2π : 0 y $\pm\frac{1}{3}$.

Como discutimos en el apartado anterior, uno de los defectos más probables desde el punto de vista energético es el defecto de tipo Stone-Wales, consistente en dos parejas de heptágono-pentágono. Asimismo, en las láminas planas de grafeno se observan irregularidades con curvatura local que pueden deberse a la presencia de un número igual de defectos heptágono-pentágono. Es interesante preguntarse, llegados a este punto, sobre cual es el efecto de tener el mismo número de defectos pentagonales y heptagonales en una muestra, con el propósito de mantener la situación de planaridad a escala macroscópica. En la ecuación (3.24) dicha situación se alcanza haciendo de manera inocente $N_5 = N_7$ (y por tanto siendo $N = N_5 + N_7$ un número par). Esta simple substitución hace que los flujos asociados a los campos $\mathbf{A}_{\mathcal{P}}$ y \mathbf{A}_{Σ} sean nulos. Si, además, la configuración de los defectos es tal que el flujo Φ_3 fuese nulo, se llega a la conclusión de que dicha configuración es equivalente a la situación de no tener ningún tipo de defectos. Esta situación es la que se daría en el caso en el que todos los defectos pentagonales y heptagonales estuvieran organizados en defectos Stone-Wales[34].

Esta situación parece estar en contradicción con estudios teóricos existentes en la literatura, tanto sobre láminas de grafeno[36, 37, 38] como de nanotubos[35] (figura

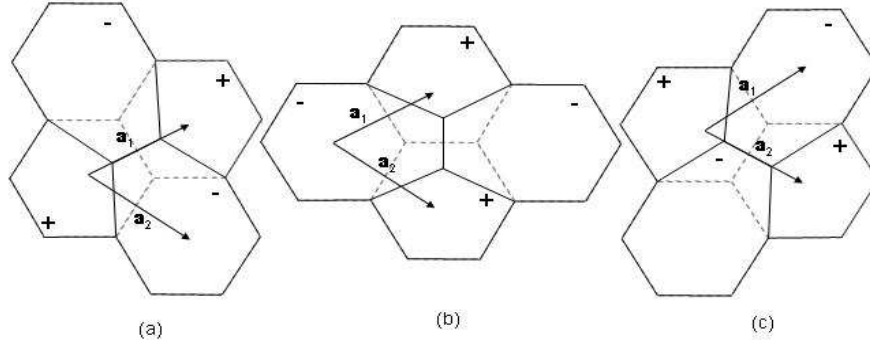


Figura 3.7: Esquema de un defecto Stone-Wales, constituido por dos pares de defectos pentagonales y heptagonales adyacentes, y de sus posibles orientaciones relativas a la red de grafeno. Estos defectos son de particular importancia en la realidad, ya poseen la energía de formación más baja de entre todos los posibles defectos que puedan ser contruidos combinando defectos aislados.

3.8), en los cuales se reporta una densidad de estados en presencia de estos defectos, diferente a la correspondiente a una lámina de grafeno o a un nanotubo perfectos.

En realidad, lo anterior no significa realmente que el modelo de campos gauge sea incorrecto. Las fases asociadas a $-\tau_2 \otimes \sigma_2$ y $\tau_3 \otimes 1$ tienen su origen en el hecho de que la red es discreta y al empalmado anómalo de la red tras la generación del defecto, y son, en principio, imprescindibles en la correcta simulación de la estructura electrónica en presencia de estos defectos. En el siguiente capítulo vamos a desarrollar un modelo basado en el comportamiento de fermiones de Dirac en espacios curvos, en el cual no sólo aparecerá de forma natural la fase asociada a la matriz Σ , que es la única fase de origen *geométrico* en el problema, asociada con la conexión de espín. Además aparecerán nuevos términos en el hamiltoniano general que originarán efectos no triviales, los cuales pueden subsanar las debilidades que presenta el modelo de campos gauge. Veremos que en realidad, el modelo de espacios curvos se reduce al modelo de campos gauge en el caso de la presencia de un solo defecto, y que es la elección de un sistema concreto de coordenadas la que hace que el punto de vista curvo se vea enmascarado. Por último, decir que, por supuesto, este modelo de espacios curvos admite de forma natural la inclusión de campos gauge externos, por lo que la

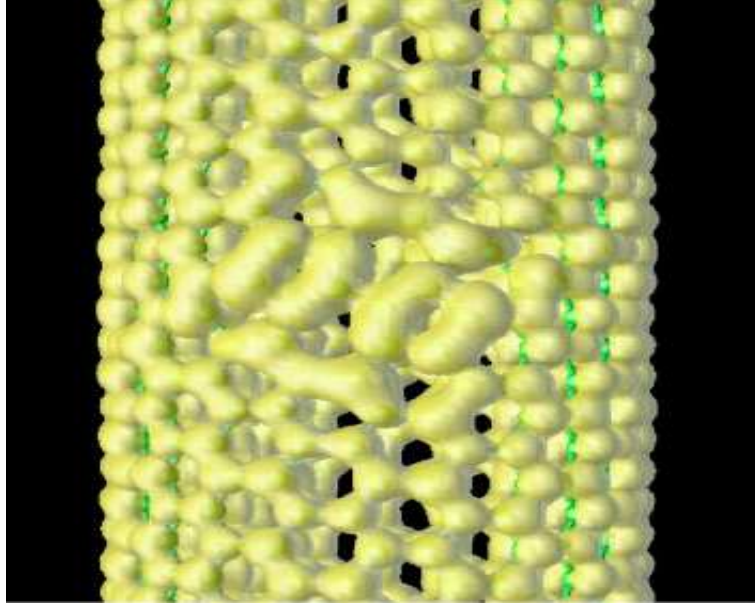


Figura 3.8: Simulación de una imagen de microscopía electrónica de efecto tunel (STM) en un nanotubo de carbono, extraído de [35]. La diferencia de potencial entre la muestra y la punta del microscopio es de 1.5 eV. En los modelos de imagen de STM más simples, la corriente \mathcal{I} que circula entre la muestra y la punta del microscopio es directamente proporcional a la densidad de estados local de la muestra: $\mathcal{I}(\mathbf{r}, V) \propto \rho(\mathbf{r}, E = V)$.

inclusión de los campos gauge asociados a las condiciones de contorno generadas por la red se ve salvaguardada.

Capítulo 4

Teoría geométrica de los defectos topológicos.



Figura 4.1: Imagen de microscopio de efecto túnel de una membrana suspendida de grafeno. En la parte central, señalizada con flechas, se encuentra una monocapa de grafeno monocristalina[39].

4.1 Introducción. Corrugaciones en grafeno.

En la introducción del capítulo anterior hemos tratado de dar una visión general sobre la descripción de irregularidades y defectos topológicos en membranas cristalinas, suponiendo que tal discusión era aplicable a una lámina suspendida de grafeno.

La primera referencia experimental relativa a las corrugaciones en láminas de grafeno suspendidas es la referencia [39]. En este trabajo, por medio de técnicas de deposición mecánicas junto con litografía de haz de electrones, los autores fueron capaces de aislar muestras de grafeno suspendidas, unidas por sus extremos a soportes metálicos.

Las medidas de microscopía de transmisión electrónica han mostrado que en dicha configuración, las muestras de grafeno presentan corrugaciones espaciales, tal y como se muestra en la figura (4.1).

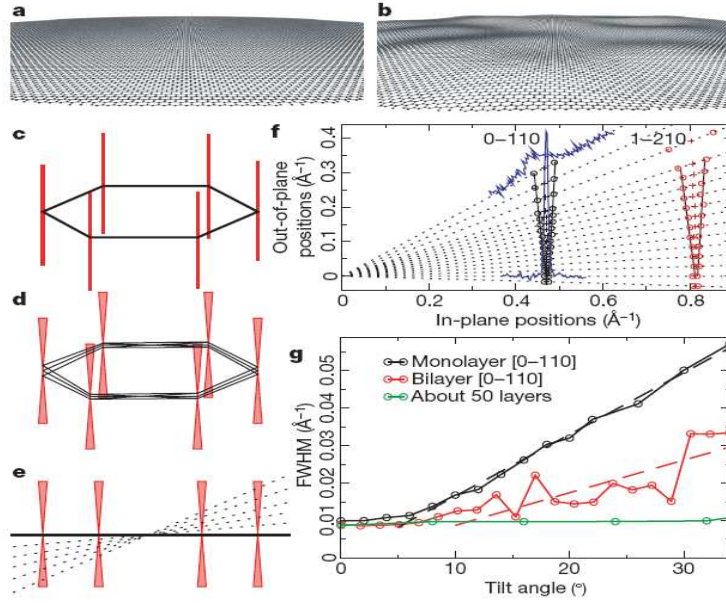


Figura 4.2: Observación experimental de una membrana de grafeno curva[39]. (f): Evolución del patrón de difracción con el ángulo de incidencia del haz electrónico. Los datos pueden compararse con la simulación de la figura (e).

Aunque la naturaleza de dichas corrugaciones es aún motivo de debate, trabajos recientes [5] muestran que dichas corrugaciones pueden tener su origen en fluctuaciones térmicas (recordemos que la teoría general de membranas descrita en el capítulo anterior mostraba que las fluctuaciones de la normal a la membrana varían con la temperatura como \sqrt{T} , a temperaturas bajas).

Otro posible origen de las corrugaciones en las muestras de grafeno es el propio desorden morfológico que presenta el sustrato. Experimentalmente, los sustratos sobre los cuales se depositan las muestras de grafeno suelen presentar una *orografía* compleja, y es de esperar que el grafeno al depositarse, adquiera de forma muy aproximada la forma del sustrato. Tal efecto se ha comprobado experimentalmente en la referencia [40]. En este capítulo vamos a estudiar las propiedades electrónicas de la tercera fuente de corrugación en muestras de grafeno: los defectos topológicos. A lo

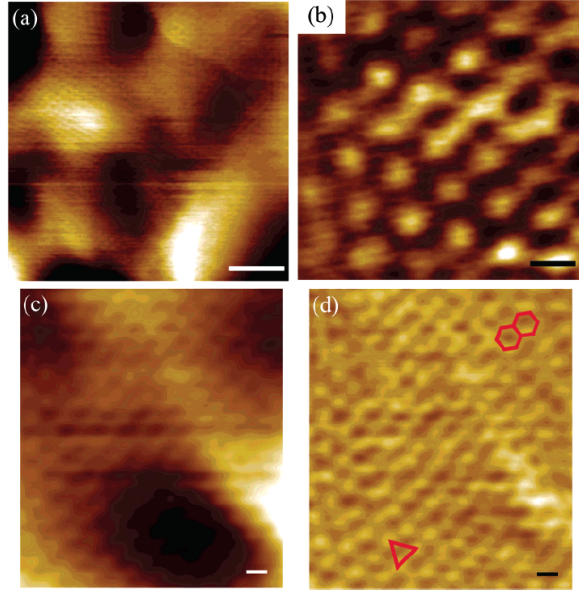


Figura 4.3: (a): Imagen típica de STM de una muestra de grafeno depositada sobre un sustrato de SiO_2 . La barra de escala es de 2 nanómetros. (b): Imagen de STM con resolución atómica de la misma muestra. La barra de escala es de 2.5 Å. (c) y (d): Diferente área de la muestra. La ordenación atómica no es perfecta, indicando que existen corrugaciones.

largo de las páginas siguientes construiremos un modelo basado en las propiedades que adquieren los fermiones de Dirac cuando se encuentran en un espacio curvo y en presencia de campos gauge externos. Este modelo, que generaliza al modelo de campos gauge, nos va a permitir obtener información física para las configuraciones de defectos en las cuales dicho modelo se hallaba comprometido, como ocurría con el caso de los defectos de tipo Stone-Wales. Además, este modelo de fermiones de Dirac ha mostrado su eficacia en la descripción de la estructura de niveles de baja energía de la molécula C_{60} [32, 9].

Podemos entender la molécula de C_{60} como un fragmento de grafeno en el que se han incluido 12 defectos pentagonales, dando como resultado una molécula con forma esférica, tal y como se aprecia en la figura (4.1). En las referencias [32, 9] se propuso un modelo de espinores en la esfera, en presencia de un campo gauge no abeliano de tipo monopolo, que simulaba el efecto de la presencia de los pentágonos en la red de grafeno. Las soluciones de la ecuación de Dirac resultante bajo esas condiciones se pueden escribir como las autofunciones de un problema de momento angular generalizado. Con este formalismo, fue posible deducir los niveles electrónicos y sus multiplicidades, permitiendo postular el modelo de fermiones de Dirac en espacios curvos y en presencia de campos gauge externos como una potente herramienta que puede ser utilizada para estudiar otros tipos de defectos.

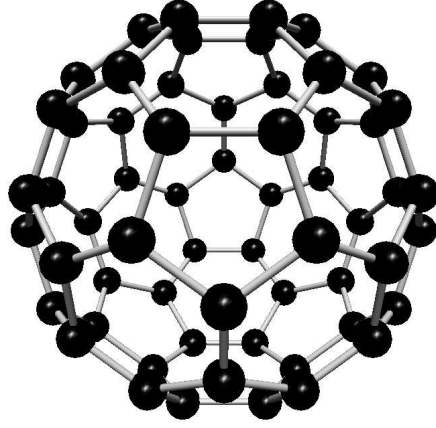


Figura 4.4: Imagen artística de una molécula de C_{60} , también conocida como fullereno.

Por último, en virtud de los resultados experimentales sobre corrugaciones en muestras de grafeno, es interesante preguntarse qué tiene que decir el modelo de espinores en espacios curvos cuando la superficie que habitan está curvada de manera suave, y la red no ha inducido ningún campo gauge externo. Al final de este capítulo trataremos de dar respuesta a esta pregunta.

4.2 Ecuación de Dirac en espacios curvos.

En la presentación del modelo de espinores en espacios curvos vamos a seguir muy de cerca la referencia[41].

En general, cuando se trata de trasladar una relación matemática definida en un espacio plano a un espacio curvo, simplemente se emplea el principio de covariancia general, que consiste en sustituir cada magnitud escalar, vectorial o un tensor general que se transforma bajo transformaciones definidas en ese espacio plano por su homólogo, que se transforma bajo transformaciones generales en el espacio curvo. Esta simple sustitución no funciona para objetos que se comportan como espinores bajo transformaciones de coordenadas. La razón matemática es que existen representaciones tensoriales del grupo de transformaciones generales, pero no existen representaciones espinoriales de dicho grupo. Esta consideración hace que haya que buscar una formulación alternativa para introducir espinores en un espacio curvo.

El formalismo adecuado para el estudio de espinores en espacios curvos es el formalismo de las tétradas. El formalismo de tétradas se basa en el Principio de Equivalencia, que afirma que en cada punto X de una superficie curva, es posible definir un sistema de coordenadas ξ_X^a que es localmente plano en dicho punto. En general, dicho sistema de coordenadas no será el mismo en todo punto de la superficie a menos que la superficie sea realmente plana. En general, podemos escribir el tensor

métrico en dicho sistema de coordenadas como

$$g_{\mu\nu} = e_\mu^a e_\nu^b \eta_{ab}, \quad (4.1)$$

donde $e_\mu^a = \frac{\partial x^a}{\partial x^\mu}$ se transforman como un conjunto de vectores covariantes bajo un cambio de coordenadas general:

$$e_\mu^a \rightarrow e_\mu'^a = \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} e_\nu^a. \quad (4.2)$$

Entendiendo este conjunto de vectores como una base en el espacio vectorial (co-tangente) definido en cada punto, podemos proyectar cualquier vector contravariante $A^\mu(x)$ en el punto x sobre dicho conjunto de vectores:

$$*A^a = e_\mu^a A^\mu. \quad (4.3)$$

Podemos generalizar la relación anterior a vectores covariantes y a tensores en general, definiendo los vectores e_a^μ . Nótese que los índices latinos bajan y suben empleando la métrica plana η_{ab} y su inversa respectivamente, y los índices griegos hacen lo mismo pero con la métrica curva $g_{\mu\nu}$. Es inmediato comprobar que, con estas reglas, el tensor métrico en estas coordenadas es, como era de esperar, $*g_{ab} = \eta_{ab}$.

Las cantidades $*A^a$ constituyen un vector contravariante en el espacio plano definido en el punto X, por lo que podemos tomar la alternativa de olvidar las cantidades tensoriales definidas en un espacio curvo general, y trabajar con el sistema de coordenadas localmente plano en cada punto que determinan e_μ^a y las cantidades tensoriales definidas en ese espacio plano.

Una vez que estamos en el sistema de coordenadas plano, cualquier otro sistema de coordenadas plano que se pueda definir será igual de válido que el inicial, por lo que podremos transformar, en el punto escogido x a través de una transformación de coordenadas plana $\Lambda(x)$, las cantidades tensoriales planas $*B^{ab\dots}_{mn\dots}$:

$$*B^{c\dots}_{p\dots} = \Lambda^c_a(x) \dots \Lambda_p^m(x) *B^{a\dots}_{m\dots}. \quad (4.4)$$

Esta regla de transformación se puede generalizar para objetos que se transformen como espinores bajo cambios de coordenadas planos:

$$*\psi_n = [D(\Lambda)]_{nm} * \psi_m, \quad (4.5)$$

donde $[D(\Lambda)]_{nm}$ es una representación espinorial de la transformación $\Lambda(x)$.

Para escribir el hamiltoniano de Dirac en una superficie curva, debemos saber también cómo se transforma la derivada de un espinor. La derivada es un objeto que se comporta como un vector bajo cambios generales de coordenadas:

$$\frac{\partial}{\partial x^\mu} \rightarrow \frac{\partial x^\nu}{\partial x'^\mu} \frac{\partial}{\partial x'^\nu}. \quad (4.6)$$

Como en los ejemplos anteriores, podemos proyectar dicho vector sobre el conjunto de vectores $\{e_a^\mu\}$ y, una vez escrito en la base plana, aplicarlo sobre una magnitud espinorial. La derivada se transformará entonces bajo una transformación de coordenadas plana $\Lambda(x)$ como

$$\begin{aligned} \Lambda(x)_a^b e_b^\mu \frac{\partial}{\partial x^\mu} [D(\Lambda(x)) * \psi(x)] &= \\ &= \Lambda(x)_a^b e_b^\mu \left\{ D(\Lambda(x)) \frac{\partial}{\partial x^\mu} * \psi(x) + \left[\frac{\partial}{\partial x^\mu} D(\Lambda(x)) \right] * \psi(x) \right\}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

Como podemos ver, la derivada de un espinor no se transforma como un vector bajo cambios de coordenadas planas. Este problema se resuelve definiendo un vector derivada covariante para espinores que tenga la forma

$$\mathcal{D}_a = e_a^\mu \left[\frac{\partial}{\partial x^\mu} + \Gamma_\mu \right]. \quad (4.8)$$

y que se transforme de forma usual bajo transformaciones planas tanto en el índice vectorial plano como en el índice espinorial:

$$\mathcal{D}_a * \psi_n \rightarrow \Lambda_a^b D(\Lambda)_{nm} \mathcal{D}_b * \psi_m. \quad (4.9)$$

Las matrices Γ_μ han de estar definidas de tal forma que su ley de transformación bajo cambios de coordenadas planas sea:

$$\Gamma_\mu \rightarrow D(\Lambda) \Gamma_\mu D^{-1}(\Lambda) - \left[\frac{\partial}{\partial x^\mu} D(\Lambda) \right] D^{-1}(\Lambda). \quad (4.10)$$

El segundo término en (4.10) va a cancelar el segundo término en (4.8) para dar lugar a la ley de transformación deseada (4.9).

Para obtener la estructura de las matrices $\Gamma_\mu(x)$ es suficiente considerar la manera en la que se comportan dichas matrices y los vectores $\{e_a^\mu\}$ bajo transformaciones en el espacio plano. El resultado es que la ley de transformación (4.10) es satisfecha por las matrices

$$\Gamma_\mu = \frac{1}{4} \gamma^a \gamma^b e_a^\rho g_{\rho\nu} e_{b;\mu}^\nu, \quad (4.11)$$

donde $e_{b;\mu}^\nu$ es la derivada covariante de los vectores e_b^ν :

$$e_{b;\mu}^\nu = \partial_\mu e_b^\nu - \Gamma_{\mu\rho}^\nu e_b^\rho. \quad (4.12)$$

Por lo tanto, empleando este formalismo, la forma covariante de la acción en un espacio curvo se obtiene reemplazando cada magnitud $B^{ab\dots}_{mn\dots}$ por su correspondiente en el sistema de coordenadas planas locales $*B^{ab\dots}_{mn\dots}$, y las derivadas por las derivadas correspondientes dependiendo de si la magnitud es un vector (por ejemplo (4.12)) o una magnitud espinorial (4.8).

En concreto, el hamiltoniano para un espinor de Dirac sin masa en un espacio curvo general se escribe de la siguiente manera:

$$H_{curv} = \frac{1}{2} \int d^2x \sqrt{g} \bar{\psi}(x) i v_F \gamma^\mu(x) (\partial_\mu + \Gamma_\mu) \psi(x). \quad (4.13)$$

En la expresión (4.13), aparte de la sustitución de la derivada covariante para el espinor ψ (4.8), las matrices $\gamma^\mu(x)$ dependientes de x están definidas a través de (4.3) como

$$\gamma^\mu(x) \equiv * \gamma^\mu(x) = \gamma^a e_a^\mu(x). \quad (4.14)$$

El hamiltoniano (4.13), de esta manera, es invariante bajo transformaciones de coordenadas generales, independientemente de la elección concreta de sistema de referencia plano ξ_X^a escogido en cada punto.

En las siguientes secciones veremos de qué manera el formalismo de espacios curvos completa el modelo de campos gauge descrito en el capítulo anterior, y veremos que información adicional nos proporciona dicho formalismo.

4.3 Descripción de un número arbitrario de disclinaciones.

Comenzaremos esta sección conectando el lenguaje de espacios curvos con el modelo para una disclinación aislada, descrito en el capítulo anterior.

Para tal fin, el primer paso es encontrar el tensor métrico que define una superficie cónica, que es la superficie que resulta de eliminar un sector angular de superficie plana (ver, por ejemplo, la figura (3.4)). El tensor métrico en la superficie plana se escribe, en coordenadas polares planas como:

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2, \quad (4.15)$$

donde las variables r y θ están definidas en $(0, \infty)$ y $(0, 2\pi)$, respectivamente. En el caso de una superficie cónica, la variable angular θ tendrá un dominio menor, concretamente, $\theta \in (0, 2\pi - \beta)$, siendo β el déficit angular que posee el cono con respecto a la superficie plana. Con el simple cambio de variables $(r, \theta) \rightarrow (r', \theta') = (r, (1 - \frac{\beta}{2\pi})\theta)$ podemos transformar el tensor métrico definido a partir de (4.15) a

$$ds^2 = dr^2 + \left(1 - \frac{\beta}{2\pi}\right)^2 r^2 d\theta^2, \quad (4.16)$$

por lo que las componentes no nulas del tensor métrico son

$$g_{rr} = 1, g_{\theta\theta} = \left(1 - \frac{\beta}{2\pi}\right)^2 r^2. \quad (4.17)$$

A partir de ahora, por sencillez, definiremos $\alpha = (1 - \frac{\beta}{2\pi})$. Utilizando el formalismo descrito en el apartado anterior, podemos calcular el conjunto de vectores $\{e_a^\mu\}$ o *díadas* y la conexión de espín. En coordenadas polares, las matrices γ^i y la conexión de espín tienen la forma:

$$\gamma^r = \gamma^1 \quad \gamma^\theta = \frac{1}{\alpha r} \gamma^2, \quad (4.18)$$

y

$$\Gamma_r = 0, \quad \Gamma_\theta = -\alpha \Sigma. \quad (4.19)$$

El hamiltoniano en coordenadas polares (4.13) se escribe entonces como

$$H_{curv} = iv_F \int d^2 \mathbf{r} \bar{\psi} \left[\gamma^1 \left(\alpha \partial_r - i \frac{\alpha}{r} \right) + \gamma^2 \frac{1}{r} \partial_\theta \right] \psi. \quad (4.20)$$

Retrocedamos brevemente al capítulo anterior, concretamente a las ecuaciones (3.14) y (3.17). De esas expresiones podemos inferir la forma funcional que tendrá un campo gauge general que procede de una condición de contorno, ya que la única manera para que se verifique $\oint \mathcal{A} d\mathbf{r} = \Phi$ es que $\mathcal{A}(\mathbf{r})$ tenga estructura de *vórtice*:

$$\mathcal{A}_i(\mathbf{r}) = \frac{\Phi}{2\pi} \varepsilon_{ij} \frac{x_j}{r^2}. \quad (4.21)$$

En coordenadas polares, el campo $\mathcal{A}(\mathbf{r})$ sólo tendrá componente angular: $\mathcal{A}_r = 0$ y $\mathcal{A}_\theta = \frac{\Phi}{2\pi}$. Puesto que en la ecuación (3.19) el campo gauge asociado a Σ entra en forma de producto escalar, $i\gamma^i \Sigma \mathcal{A}_i$, siendo el producto escalar un invariante bajo cambio de coordenadas, en coordenadas polares tendrá la forma $i\gamma^\theta \Sigma \mathcal{A}_\theta$. Como $\Sigma = \gamma^3$ y $\gamma^\theta = \frac{1}{r} \gamma^2$, concluimos inmediatamente que, en coordenadas polares, el término asociado al campo gauge en el hamiltoniano (3.19) es $A_\theta = i \frac{\alpha \gamma^1}{r}$.

Podemos escribir el hamiltoniano en coordenadas polares planas como

$$H_{gauge} = iv_F \int d^2 \mathbf{r} \bar{\psi} \left[\gamma^1 \left(\partial_r - i \frac{\alpha}{r} \right) + \gamma^2 \frac{1}{r} \partial_\theta \right] \psi \quad (4.22)$$

y compararlo directamente con (4.20). La primera apreciación es que en ambos formalismos, como ya hemos mencionado anteriormente, aparece el mismo término correspondiente al campo gauge. Sin embargo, existe una diferencia entre ambos hamiltonianos, correspondiente al término de la derivada radial: mientras que en (4.20) el término es $\alpha \gamma^1 \partial_r$, en (4.22) dicho término es simplemente $\gamma^1 \partial_r$.

Podemos interpretar esta diferencia en términos de la aparición de una velocidad de Fermi modificada. Consideremos de nuevo el hamiltoniano de Dirac en una superficie plana, y calculemos el operador velocidad en primera cuantización. De las ecuaciones de Heisenberg, tenemos que

$$v^a = -i [H_D, x^a] = v_F \gamma^a. \quad (4.23)$$

En coordenadas polares, y en el espacio plano, el operador velocidad tiene como componentes

$$v_r = v_F \gamma^1 \quad v_\theta = v_F \frac{1}{r} \gamma^2, \quad (4.24)$$

sin embargo, en las coordenadas definidas en (4.16), con el hamiltoniano definido en (4.20) dicho operador velocidad tiene la expresión

$$v_r^{curv} = \alpha v_F \gamma^1 \quad v_\theta^{curv} = v_F \frac{1}{r} \gamma^2, \quad (4.25)$$

comparando (4.24) y (4.25) llegamos a la conclusión anunciada anteriormente: en el caso de una disclinación aislada, hemos convertido el hamiltoniano de Dirac curvo (4.13) en el hamiltoniano plano con un campo gauge (4.19) *y una velocidad modificada* (4.25), *ausente en el modelo de campos gauge* (4.22). La aparición de una velocidad modificada por la existencia de defectos (y en general, por el hecho de tener espinores inmersos en un espacio curvo) hace que el modelo de espacios curvos sea más rico que el modelo de campos gauge, pudiendo obtener variaciones en las propiedades electrónicas respecto a la situación ideal en configuraciones de defectos en las cuales el modelo de campos gauge no ofrecería nada, como es el caso, por ejemplo, de los defectos Stone-Wales. En (4.22) y (4.20) no se han incluido los campos gauge correspondientes a las condiciones de contorno cuyo origen es la red. La forma para incluirlos es semejante al campo (4.21), puesto que en todos los casos el campo gauge es singular, solamente cambia la matriz que acompaña a dicho campo. La ecuación (4.13) para espinores en una superficie curva que estén acoplados a un campo gauge general $\mathcal{A}_{\mu,a}$ tiene la forma

$$H_{curv} = \frac{1}{2} \int d^2x \sqrt{g} \bar{\psi}(x) i v_F \gamma^\mu(x) (\partial_\mu + \Gamma_\mu - i q_a \mathcal{A}_{\mu,a}) \psi(x). \quad (4.26)$$

Nuestro objetivo es entonces aplicar el formalismo de espacios curvos cuando consideramos la situación de una lámina de grafeno que contiene un número arbitrario de defectos localizados en posiciones conocidas. Para tal fin, procederemos de manera similar al caso de una disclinación aislada, encontrando una métrica que describa apropiadamente el espacio curvo generado por un conjunto de disclinaciones, y calculando posteriormente los vectores e_a^μ y la conexión de espín.

Podemos trabajar en este caso por analogía. Las disclinaciones en grafeno son el análogo bidimensional a las cuerdas cósmicas en $3 + 1$ dimensiones[42, 25, 43].

Podemos encontrar la métrica que describe un conjunto arbitrario de defectos a partir de la métrica para un defecto aislado (4.16) empleando los siguientes cambios de variables:

$$r' = (\alpha r)^\alpha, \quad \theta' = \theta \quad (4.27)$$

y

$$x = r' \cos \theta', \quad y = r' \sin \theta'. \quad (4.28)$$

La métrica (4.16) se escribe entonces, en coordenadas conformes (x, y) , como

$$ds^2 = e^{2\Lambda(x,y)} (dx^2 + dy^2), \quad (4.29)$$

quedando definido el factor conforme $\Lambda(x, y)$ de la siguiente manera:

$$\Lambda(x, y) = \lambda \log r'. \quad (4.30)$$

quedando el parámetro λ definido como $\lambda = 1 - \alpha = \frac{\beta}{2\pi}$. Para el caso de un número N de defectos situados en las posiciones \mathbf{r}'_i , y con una amplitud angular arbitraria λ_i , generalizamos el factor conforme (4.30) a

$$\Lambda(x, y) = \sum_i^N \lambda_i \log(|\mathbf{r}' - \mathbf{r}'_i|). \quad (4.31)$$

Podemos calcular, a modo de comprobación de la generalización (4.31), la curvatura intrínseca correspondiente a la métrica (4.29). En coordenadas conformes[44] la curvatura intrínseca para una superficie bidimensional descrita en coordenadas conformes satisface la siguiente relación

$$R = e^{-2\Lambda(x,y)} \nabla^2 \Lambda, \quad (4.32)$$

que con (4.31) da $R = \frac{\lambda}{r'^{2\lambda}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$. En coordenadas polares resulta ser la expresión conocida

$$R = \sum_i^N \frac{\beta_i}{2\pi} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i), \quad (4.33)$$

es decir, la curvatura generada por los defectos sobre la superficie bidimensional está concentrada en los sitios donde se encuentran los defectos, siendo el resto de la superficie plana.

Escogeremos el sistema localmente plano definido a partir de los vectores e_μ^a que tengan las siguientes componentes $e_1^1 = e_2^2 = e^{-\Lambda}$ y $e_2^1 = e_1^2 = 0$. En dicho sistema de coordenadas localmente plano, la conexión de espín es

$$\begin{aligned} \Gamma_1 &= \frac{1}{2} \gamma^1 \gamma^2 \partial_y \Lambda, \\ \Gamma_2 &= \frac{1}{2} \gamma^2 \gamma^1 \partial_x \Lambda. \end{aligned} \quad (4.34)$$

4.4 Densidad de estados.

A continuación analizaremos las consecuencias físicas que conlleva la existencia de defectos topológicos en una lámina de grafeno, en concreto, analizaremos los cambios en la densidad local de estados. En los ejemplos que discutiremos a continuación

hemos optado por mantenernos en el nivel de complejidad más bajo, de tal forma que estudiaremos configuraciones de defectos para las cuales las contribuciones de los campos gauge asociados a las matrices Σ y $R_{\mathcal{P}}$ son nulas, tal como discutimos en el capítulo anterior. De este modo, podremos centrarnos en entender de qué manera la curvatura de la lámina de grafeno modifica la estructura electrónica dentro de este modelo geométrico.

Como sabemos del capítulo 1, la densidad de estados, definida como el número de estados electrónicos por unidad de área y de energía, se puede calcular a partir de la función de Green a dos puntos, siendo la densidad de estados la parte imaginaria de dicha función de Green. En una lámina de grafeno perfecto, debido a que existe simetría traslacional, dicha densidad de estados es independiente de la posición y es proporcional al valor absoluto de la energía. En presencia de desorden, la simetría bajo translaciones se pierde y la función de Green a dos puntos deja de depender de la combinación $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ y por lo tanto la densidad de estados pasará a depender de la posición en la lámina:

$$\rho(\mathbf{r}, E) = \lim_{\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'} \text{Tr} \text{Im} G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \gamma^0. \quad (4.35)$$

En lo que sigue, vamos a calcular la función de Green a dos puntos resolviendo la ecuación de Green en *espacios curvos*:

$$\gamma^0 E G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') - i v_F \gamma^j(\mathbf{r}) (\partial_j + \Gamma_j) G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{\sqrt{g}} \delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (4.36)$$

La ecuación (4.36) es en principio, demasiado complicada para resolverla de forma general, por lo que optaremos por resolverla de forma perturbativa en el parámetro λ obteniendo correcciones perturbativas a la densidad de estados local.

Desarrollando en serie de potencias de λ en (4.36), obtenemos a primer orden en λ la siguiente ecuación:

$$\gamma^0 E G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') - i v_F \gamma^j \partial_j G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') - V(E, \mathbf{r}) G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = \delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (4.37)$$

que interpretamos como la ecuación de Green para la función de Green en el espacio plano en presencia del potencial externo $V(E, \mathbf{r})$,

$$V(E, \mathbf{r}) = -E \Lambda(\mathbf{r}) + i v_F \Lambda(\mathbf{r}) \gamma^j \partial_j + \frac{i v_F}{2} \gamma^j (\partial_j \Lambda(\mathbf{r})). \quad (4.38)$$

En la expresión (4.38) reconocemos términos similares de velocidad dependiente de la posición generada por el desorden

$$i v_F \Lambda(\mathbf{r}) \gamma^j \partial_j$$

que aparece en (4.25) y el término correspondiente al campo gauge

$$\frac{i v_F}{2} \gamma^j (\partial_j \Lambda(\mathbf{r}))$$

, análogo a (4.21). También obtenemos un término extra, dependiente de la energía, que no aparece en el análisis que hicimos sobre el hamiltoniano. Este término es consecuencia de la estrategia que estamos utilizando para calcular la densidad de estados a partir de la resolución de la ecuación de Green (4.36). Una vez que hemos

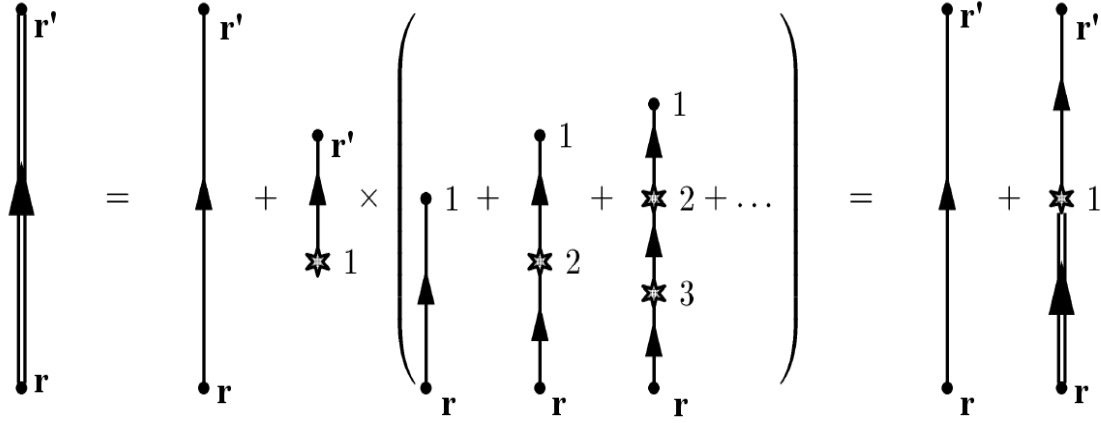


Figura 4.5: Representación pictórica de la ecuación integral (4.39). La línea vertical continua representa a $G(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}')$ y la estrella representa el potencial $V(E, \mathbf{r}_j)$.

transformado el problema de resolver la ecuación de Green en un espacio curvo al problema de resolver la ecuación de Green en un espacio plano con un potencial de desorden $V(E, \mathbf{r})$, podemos emplear la metodología estándar diseñada para resolver estos problemas[45].

La ecuación diferencial (4.37) puede convertirse en la siguiente ecuación integral

$$G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int d^2\mathbf{r}_2 G_0(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}_2) V(E, \mathbf{r}_2) G(E, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}'), \quad (4.39)$$

que resolveremos de forma iterativa en serie de potencias de λ , parámetro que se encuentra incluido en la función $\Lambda(x, y)$. Por consistencia, nos quedamos en el primer orden en λ , ya que en la deducción de la ecuación (4.37) nos quedamos con el primer orden en λ . El cálculo de la función de Green a mayor orden en λ requeriría calcular $V(E, \mathbf{r})$ a orden $O(\lambda^2)$, así como el término de orden $O(\lambda^2)$ para el potencial (4.38). A orden $O(\lambda)$, la función de Green (4.39) se escribe como

$$G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') \simeq G_0(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int d^2\mathbf{r}_2 G_0(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}_2) V(E, \mathbf{r}_2) G_0(E, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'). \quad (4.40)$$

Puesto que se trata de utilizar la función de Green para calcular las correcciones a la densidad de estados $\Delta\rho(E, \mathbf{r}) \equiv \rho(E, \mathbf{r}) - \rho^0(E, \mathbf{r})$, nos centraremos en el segundo término de (4.40), del cual extraeremos $\Delta\rho(E, \mathbf{r})$.

Empleando la expresión de la función de Green libre:

$$G_0(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} \left(\frac{E\gamma^0 - v_F \gamma^j k_j}{E^2 - v_F^2 k^2 + i\epsilon} \right) e^{-i\mathbf{k}(\mathbf{r}-\mathbf{r}')} \quad (4.41)$$

y

$$\Lambda(\mathbf{r}_2) = \int \frac{d^2 \mathbf{p}}{4\pi^2} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_2} \Lambda(\mathbf{p}), \quad (4.42)$$

con

$$\Lambda(\mathbf{p}) = \sum_j^N \frac{\lambda_j e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}_j}}{p^2} \quad (4.43)$$

en el límite $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{r}$ la traza del segundo término de la ecuación (4.40) queda

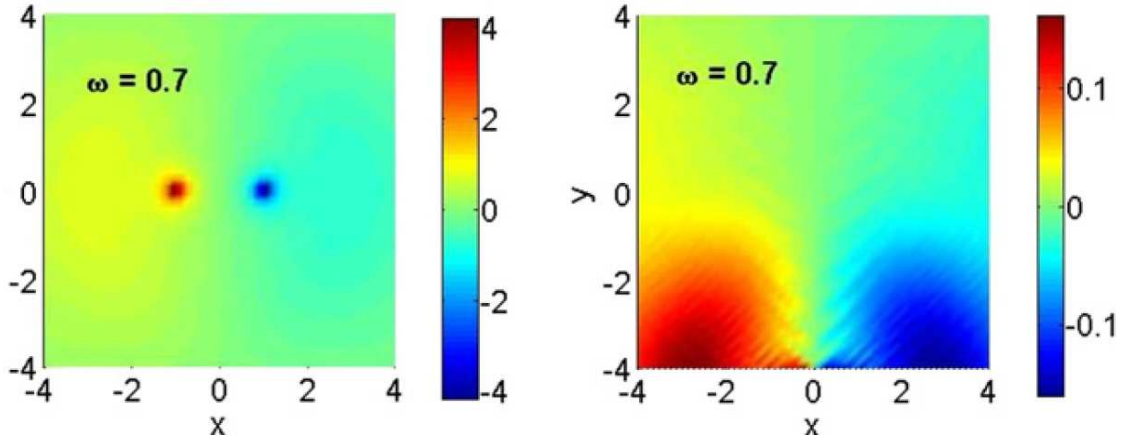


Figura 4.6: Izquierda: Imagen de la corrección a la densidad local de estados inducida por un par heptágono-pentágono en una porción amplia de la muestra de grafeno, a una energía normalizada $\omega = 0.7$. El par de defectos se encuentra localizado en el centro. La imagen muestra que la corrección a la densidad de estados es mayor en puntos próximos a las posiciones de los defectos. Derecha: Detalle de la densidad de estados con el par localizado fuera de la imagen.

$$TrG(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}) = \frac{\lambda}{2\pi^3 v_F^2} \int d^2 \mathbf{p} e^{i\mathbf{p}\mathbf{r}} \Lambda(\mathbf{p}) \Gamma(E, \mathbf{p}), \quad (4.44)$$

donde $\Gamma(E, \mathbf{p})$ es

$$\Gamma(E, \mathbf{p}) = \int d^2 \mathbf{q} \frac{8E^3 - 2Eq^2}{(E^2 - q^2 + i\epsilon)(E^2 - (q - p)^2 - i\epsilon)}. \quad (4.45)$$

La corrección a la densidad de estados $\Delta\rho(E, \mathbf{r})$ se obtiene, como hemos dicho, tomando la parte imaginaria de (4.44):

$$\Delta\rho(E, \mathbf{r}) = \frac{2E\lambda}{2\pi^3 v_F^2} \sum_j^N \int dk \frac{J_0(Er_j)}{k^2} (4E^2 - k^2) F(E, k), \quad (4.46)$$

donde $J_0(Er_j)$ es la función de Bessel de primera especie de orden 0, y la función $F(E, k)$ viene dada por las siguientes expresiones

$$F(E, k) = \begin{cases} \frac{-\arg \tanh\left(\frac{\sqrt{k^2 - E^2}}{\sqrt{k^2 - 4E^2}}\right)}{\sqrt{k^2 - 4E^2}}, & 4E^2 < k^2 \\ \frac{\arctan\left(\frac{k}{\sqrt{4E^2 - k^2}}\right)}{\sqrt{4E^2 - k^2}}, & 4E^2 > k^2 \end{cases} \quad (4.47)$$

A continuación utilizaremos el resultado (4.46) para discutir algunos casos de interés físico. Comenzaremos por la situación en la que tenemos una única pareja de defectos pentágono-heptágono situados en posiciones $(-1, 0)$ y $(1, 0)$, en notación quiral. En la figura (4.6) se muestra la corrección a la densidad de estados para esta

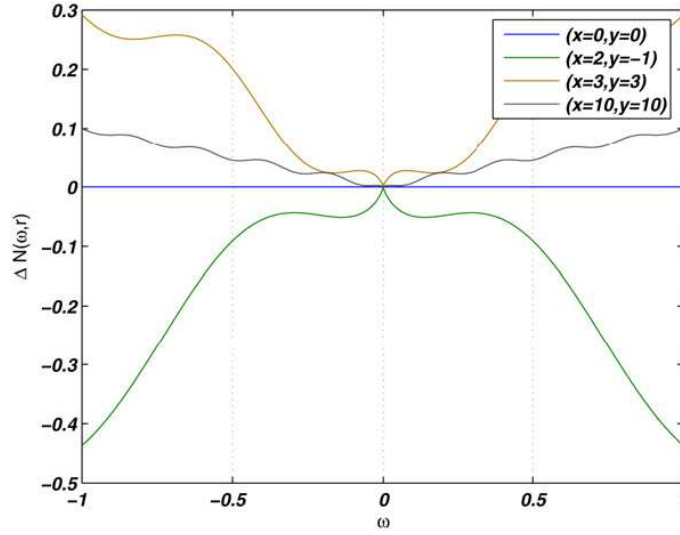


Figura 4.7: Corrección a la densidad de estados en diferentes puntos de la muestra, indicados en la leyenda, como función de la energía. El par heptágono-pentágono se encuentra localizado en las mismas posiciones que en la figura (4.4).

disposición de defectos a una energía (normalizada a una frecuencia de corte Ω) de $\omega = 0.7$. El color verde corresponde a las zonas donde la corrección es casi nula o nula, el color rojo corresponde a zonas donde aparece acumulación de densidad de estados, siendo el azul correspondiente a zonas donde la densidad de estados ha disminuido. En la figura (4.6, izquierda) la imagen está dominada por la densidad de estados en las regiones que rodean ambos defectos. En torno a la posiciones de los defectos, la corrección a la densidad de estados (4.46) es divergente, y la validez de la aproximación (4.40) se pierde. Sin embargo, lejos de las posiciones de los defectos, donde las aproximaciones realizadas tienen validez, observamos una modulación de la densidad de estados que presenta un marcado carácter bipolar, hecho que está de acuerdo con simulaciones numéricas[46]. La figura (4.7) muestra la densidad de estados para

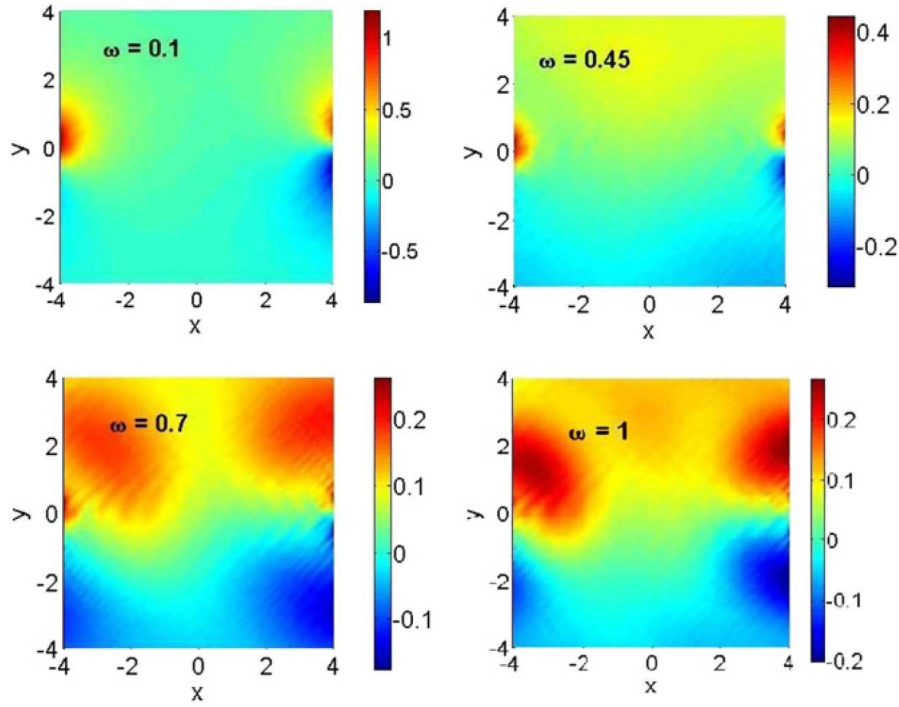


Figura 4.8: Densidad de estados local para dos pares de defectos heptágono-pentágono para cuatro energías diferentes.

la misma disposición de defectos que la figura (4.6) como función de la energía, en distintos puntos de la lámina. En esta figura se ve de forma clara que la densidad de estados presenta oscilaciones a medida que la variamos la energía, y dichas oscilaciones dependen fuertemente de la posición sobre la lámina de grafeno donde se observen. En una muestra real, los defectos se encuentran repartidos de forma aleatoria y, obviamente, en mayor número, así que podemos estudiar configuraciones de defectos que, cumpliendo las ligaduras impuestas para la anulación de los campos gauge extras, puedan representar esta situación más realista. En la figura (4.8) mostramos, para diferentes energías, la corrección a la densidad de estados local para dos defectos compuestos de un heptágono y un pentágono. A energías bajas, la corrección es casi cero, salvo en las regiones que rodean los defectos, en donde, como hemos dicho, la aproximación adoptada carece de validez. A medida que aumentamos la energía, la densidad de estados se va viendo modificada en forma de oscilaciones inhomogéneas, debidas principalmente a la orientación relativa de los defectos (nótese que se sigue apreciando el carácter dipolar en las proximidades de los pares). También es relevante mencionar que no parece que la longitud de onda de las oscilaciones escale de manera inversa con la energía, como ocurre con un dipolo en electromagnetismo clásico.

Los defectos de tipo Stone-Wales constituyen otra disposición de defectos de interés para estudiar. Como ya sabemos, estos defectos son los que tienen mayor pro-

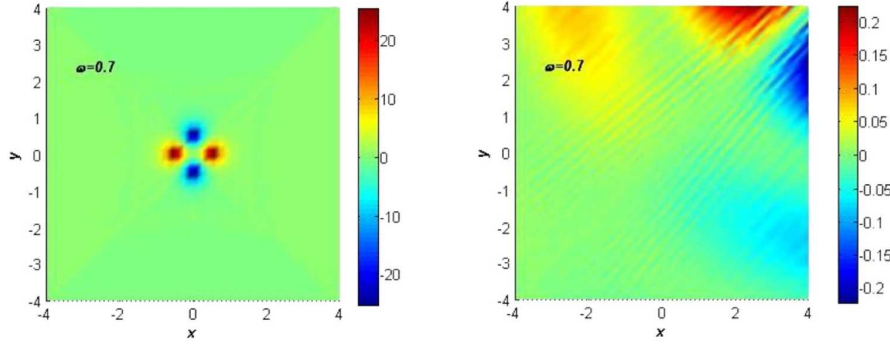


Figura 4.9: Corrección a la densidad de estados local para un defecto de tipo Stone-Wales.

babilidad de ocurrir en la realidad, ya de forma natural o en muestras artificialmente dañadas.

En la figura (4.9) se muestra la densidad de estados a una energía normalizada constante $\omega = 0.7$ en una muestra amplia de grafeno que contiene en su centro un defecto Stone-Wales. Como en los casos anteriores, las modificaciones en la densidad de estados se encuentran fuertemente atenuadas, debido a la presencia de las correcciones no válidas en los entornos muy próximos al defecto. En la figura (4.9, derecha), se muestra una sección de lámina de grafeno con el defecto localizado fuera del plano. Como antes, se observan claramente ondulaciones ordenadas en la densidad de estados, debidas a la simetría del defecto, y pueden compararse, al menos de forma cualitativa, con modificaciones a la densidad de estados encontradas en simulaciones de nanotubos que contienen dichos defectos[35].

4.5 Efecto de la curvatura suave en la estructura electrónica.

En las secciones anteriores hemos empleado el formalismo de espinores en espacios curvos para describir el comportamiento electrónico de baja energía en una lámina de grafeno con curvatura inducida únicamente por defectos topológicos.

En la introducción del presente capítulo hemos visto que gran la mayoría de muestras de grafeno depositadas sobre un sustrato[40] o suspendidas[5] presentan corrugaciones espaciales, visibles a través de microscopía de por transmisión de electrones[47] y por espectroscopía de efecto túnel[48].

Aunque la existencia de defectos topológicos es una fuente de corrugación en grafeno, no podemos decir que sea la única: fluctuaciones térmicas y corrugaciones en el sustrato inducirán curvatura en una lámina de grafeno. Por otro lado, sabemos que la curvatura inducida por los defectos es singular y está localizada donde se sitúa

el defecto. La pregunta que nos hacemos ahora es qué efectos podemos esperar de una muestra de grafeno donde, sin especificar el motivo, se presentan regiones con curvatura suave y más o menos extensa.

Para responder esa pregunta contamos con las herramientas matemáticas que hemos descrito en las secciones anteriores, por lo que seguiremos el mismo programa que propusimos para el estudio de los efectos en la estructura electrónica en grafeno curvado por defectos topológicos.

El primer paso es describir la superficie de grafeno curvado a través de una métrica. Consideraremos que la superficie, inmersa en el espacio tridimensional, se puede describir por medio de la función $z(\mathbf{r})$ que representa la altura de la superficie con respecto a la situación plana $z = 0$. Por sencillez, consideraremos regiones curvas con simetría bajo rotaciones, por lo que z será función únicamente de la coordenada radial r : $z(\mathbf{r}) = z(r)$. La métrica de la superficie vendrá descrita entonces por el elemento de línea

$$ds^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + dz^2 = (1 + \alpha f(r)) dr^2 + r^2 d\theta^2, \quad (4.48)$$

donde hemos escrito (α es un parámetro libre que emplearemos para cuantificar cuánto nos alejamos de la situación plana)

$$dz^2 = \left(\frac{dz}{dr} \right)^2 dr^2 \equiv \alpha f(r) dr^2. \quad (4.49)$$

Los únicos requisitos sobre la función f son que la superficie sea asintóticamente

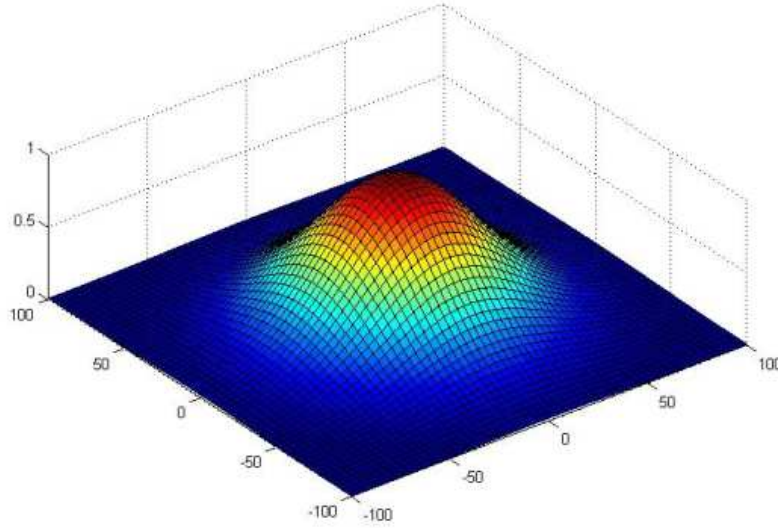


Figura 4.10: Forma de la corrugación descrita por la función $z(\mathbf{r})$ para simular la superficie curva suave de grafeno.

plana, es decir, $f(r) \rightarrow 0$ en el límite $r \rightarrow \infty$, y que la superficie $z(r)$ sea suave en el origen $r = 0$, condición que se traduce en que la función f se anule suficientemente rápido en el origen. El ejemplo más sencillo de dicha situación es el de una corrugación con forma de gaussiana, que utilizaremos para mostrar de qué manera funciona el modelo:

$$z = A \exp\left(-\frac{r^2}{b^2}\right), \quad (4.50)$$

donde A es la altura máxima de la gaussiana, y b es la *anchura* de la gaussiana. Con esta elección para la función $z(r)$ la función $f(r)$ y el parámetro α quedan definidos como

$$f(r) = 4 \left(\frac{r}{b}\right)^2 \exp\left(\frac{-2r^2}{b^2}\right) \quad (4.51)$$

y $\alpha = (A/b)^2$. Las corrugaciones que se observan experimentalmente nos proporcionan valores típicos para el cociente entre la anchura y la altura de la gaussiana se pueden encontrar en las referencias [39] y [49], variando en un rango de entre 0.1 y 0.3. Dicho rango se traduce para el parámetro α en 0.01 y 0.1, aproximadamente, permitiéndonos estudiar el efecto de la curvatura en la densidad de estados en el régimen perturbativo del parámetro α .

Los vectores e_μ^a calculados para la métrica definida en (4.48) se pueden escribir de forma matricial como

$$e_\mu^a = \begin{pmatrix} (1 + \alpha f)^{1/2} \cos \theta & -r \sin \theta \\ (1 + \alpha f)^{1/2} \sin \theta & r \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (4.52)$$

Los vectores descritos en (4.52) no se reducen a los vectores e_μ^a planos cuando $\alpha = 0$ que corresponderían a la situación plana en (4.18). Esto se debe a que la condición (4.1) no define de forma unívoca los vectores e_μ^a , y la elección de un conjunto u otro no tiene ninguna relevancia a la hora de calcular magnitudes físicas. Este hecho va a quedar patente una vez conocidas las componentes de la conexión de espín:

$$\Gamma_r = 0, \quad \Gamma_\theta = \frac{1 - (1 - \alpha f)^{-1/2}}{2} \gamma^1 \gamma^2 \quad (4.53)$$

La elección de díadas (4.53) no se reduce al caso plano descrito en la sección anterior, cuando estudiamos el efecto de una disclinación aislada en coordenadas polares en el límite plano $\beta = 0$. Esto se debe simplemente a la libertad definición de las díadas que nos permite la ecuación (4.1). La ley de transformación de (4.52) en el límite $\alpha = 0$ al sistema de vectores e_μ^a descrito en la sección anterior en el límite $\beta = 0$

$$e_\mu^a = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & r \end{pmatrix}, \quad (4.54)$$

es una simple rotación de ángulo θ en torno al eje perpendicular a la superficie:

$$\Lambda^\mu{}_\nu(x) = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}. \quad (4.55)$$

La representación espinorial (4.5) de la transformación (4.55) es la conocida matriz

$$D(\Lambda^\mu{}_\nu) = \exp\left(\frac{1}{2}\theta\gamma^3\right). \quad (4.56)$$

Introduciendo esta $D(\Lambda)$ en la expresión (4.10) obtenemos la conexión de espín para el sistema de coordenadas decrito por (4.54) en el límite plano:

$$\Gamma_\mu = i\gamma^3\partial_\mu\theta(\mathbf{r}) \Rightarrow \gamma^\theta A_\theta = \gamma^1\frac{1}{r},$$

como cabía esperar.

Para calcular la densidad de estados, seguiremos la estrategia definida en la sección anterior para el caso de múltiples defectos. Una vez calculada la conexión de espín y las díadas, resolveremos perturbativamente la ecuación de Green (4.36) para este caso, y de ella extraeremos las correcciones a la densidad de estados local. Aunque la estrategia a seguir sea la misma, vamos a proceder de un modo ligeramente diferente al caso anterior, para aprovechar al máximo las ventajas de la simetría rotacional que presenta el problema.

Puesto que vamos a trabajar a orden $O(\alpha)$, desarrollaremos el término $g^{-1/2}$ que multiplica a $\delta^{(2)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ en el lado derecho de (4.36): $g^{-1/2} \simeq \frac{1}{r}(1 - \frac{\alpha f}{2})$. En cuanto al lado izquierdo de (4.36), el desarrollo en serie a orden $O(\alpha)$ genera el término de potencial

$$V(r, \theta) = \frac{iv_F\alpha f(r)}{2}\Gamma(\theta)\left(\frac{1}{2r} - \partial_r\right), \quad (4.57)$$

en donde la función $\Gamma(\theta)$ quedará definida más adelante. En el potencial (4.57) junto con el término libre que aparecerá en la ecuación de Green, podemos identificar los términos de velocidad de Fermi modificada en la dirección radial, a orden $O(\alpha)$:

$$v_r = v_F\Gamma(\theta)\left(1 - \frac{1}{2}\alpha f(r)\right),$$

y el potencial magnético

$$A_\theta = \frac{\alpha f(r)}{2r}.$$

El campo magnético asociado a A_θ , a orden más bajo en el parámetro α es

$$B_z = \frac{1}{4r}\alpha f'(r). \quad (4.58)$$

La magnitud de este campo magnético resulta ser del orden de 0.5 a 2 Teslas, compatible con las estimaciones dadas en la referencia [49], siendo una posible explicación a la ausencia de localización débil descrita allí. Es interesante notar que la velocidad de Fermi modificada por la curvatura es siempre menor que el valor v_F , independientemente del tipo de superficie considerada. Inspiradas por este trabajo se han realizado

recientemente medidas de microscopía túnel sobre muestras de grafeno suspendido que sugieren la existencia de una variación local de la velocidad de Fermi. El análisis de estos resultados experimentales en el marco de la teoría de espinores en grafeno curvo será objeto de un estudio futuro.

A continuación expondremos los resultados obtenidos para las correcciones a la densidad de estados. El primer término en el desarrollo de $G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}')$ equivalente a (4.40), teniendo en cuenta los dos términos originados por $g^{-1/2}$ y la representación de la función delta de Dirac en coordenadas polares, es:

$$G(E, \mathbf{r}, \mathbf{r}') = G_0(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}') - \frac{1}{2} \alpha f(r) G_0(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}') + \int d^2 \mathbf{r}_2 G_0(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}_2) V(\mathbf{r}_2) G_0(E, \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'). \quad (4.59)$$

Aunque en el caso de múltiples defectos topológicos, trabajamos con la representación

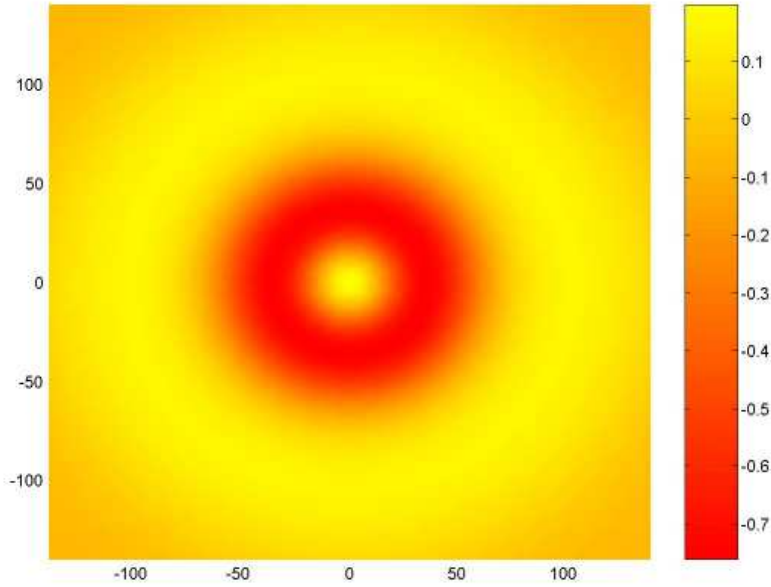


Figura 4.11: Corrección a la densidad de estados local bajo la corrugación en una lámina de grafeno. Color oscuro significa una contribución negativa a la densidad de estados, mientras que la escala de colores clara indicará contribuciones positivas respecto de la densidad de estados libre para el grafeno a la energía dada.

de momentos del propagador, aquí nos mantendremos en el espacio real, por lo que tendremos que definir el propagador de Dirac (4.41) en coordenadas polares. La forma más sencilla es aplicar la bien conocida relación existente entre el propagador de Dirac y el propagador de Klein-Gordon

$$G_{0Dirac} = D(x) G_{0Klein-Gordon} \quad (4.60)$$

a través del operador de Dirac en coordenadas polares:

$$D(x) = \gamma^0 E + i \left(\Gamma(\theta) \partial_r + \Gamma'(\theta) \frac{1}{r} \partial_\theta \right), \quad (4.61)$$

donde

$$\begin{aligned} \Gamma(\theta) &= \gamma^1 \cos \theta + \gamma^2 \sin \theta, \\ \Gamma'(\theta) &= -\gamma^1 \sin \theta + \gamma^2 \cos \theta. \end{aligned} \quad (4.62)$$

El propagador de Klein-Gordon en el espacio de posiciones tiene la forma

$$G_{0Klein-Gordon}(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{i}{4} H_0(E|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (4.63)$$

siendo H_0 la función de Hankel de orden cero[50]. La aplicación del operador (4.61) a (4.63) genera la siguiente expresión para el propagador de Dirac en términos de H_0 y la función de Hankel de orden uno:

$$G_{0Dirac}(E, \mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{-iE}{4} \gamma^0 H_0(E|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) - \frac{E}{4|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} H_1(E|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) [r\Gamma(\theta) - r'\Gamma(\theta')]. \quad (4.64)$$

Usando las expresiones (4.64), (4.59) y (4.35), llegamos a la expresión siguiente para la densidad de estados local:

$$\begin{aligned} \rho(E, r') &= 4g \frac{E}{2\pi} \frac{1}{(v_F \hbar)^2} \left[1 - \frac{\alpha f(r')}{2} + \frac{\alpha}{8} \int dr d\theta \right. \\ &\quad \left. 4E^2 f(r) r \frac{r - r' \cos(\theta - \theta')}{(r^2 + r'^2 - 2rr' \cos(\theta - \theta'))^{1/2}} Y_1(E\Delta r) J_1(E\Delta r) - \right. \\ &\quad \left. [2f'(r) + rf''(r) Y_0(E\Delta r) J_0(E\Delta r)] \right], \end{aligned} \quad (4.65)$$

en donde hemos definido $\Delta r = |r - r'|$ y $J_{0,1}, Y_{0,1}$ son funciones de Bessel de primera y segunda especie, respectivamente. Exceptuando el cálculo explícito de los factores geométricos, en los cálculos anteriores, no se ha hecho mención explícita a la forma concreta de la corrugación, por lo que, aunque en las figuras se haya escogido una forma de gaussiana, la discusión que sigue será general para cualquier tipo de función $z(r)$ axialmente simétrica.

De la ecuación (4.65) se aprecia que, debido a la presencia de funciones de Bessel, la corrección a la densidad de estados muestra oscilaciones cuya frecuencia crece al aumentar la energía y cuya amplitud decrecerá con la distancia como r^{-1} . En la figura (4.11) se muestra la corrección a la densidad de estados local para una corrugación correspondiente a los parámetros $b = 50\text{\AA}$ y una energía $E = 0.1\text{eV}$. El máximo valor de la corrección con respecto al valor de la densidad de estados libre a esa energía es del orden de un uno por ciento, para una corrugación correspondiente al valor $\alpha \sim 0.01$.

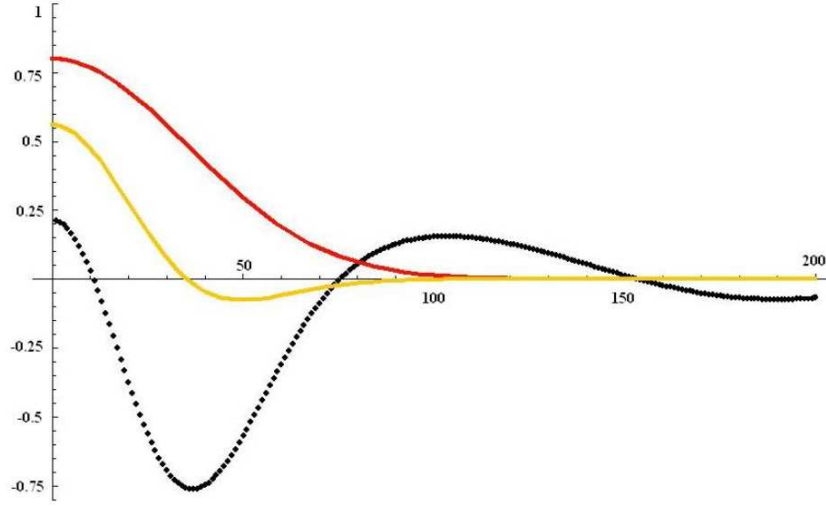


Figura 4.12: Comparación entre la corrección a la densidad de estados (línea de puntos) en unidades arbitrarias, la forma de la corrugación (color rojo) y la curvatura de dicha corrugación (color amarillo).

En la figura (4.12) comparamos la corrección a la densidad de estados con la morfología de la corrugación (en este caso sí definida como una gaussiana) y la curvatura de la superficie descrita por dicha gaussiana. A bajas energías, se puede ver que el valor mínimo de la corrección está correlacionado con el primer cero de la curvatura, que, de nuevo para el caso particular de la gaussiana, corresponde a $\sqrt{2}b$.

En el caso general de una corrugación de perfil arbitrario, se puede demostrar que el potencial gauge efectivo no contribuye a la corrección a la densidad de estados a primer orden en teoría de perturbaciones. En este caso, como el caso de los defectos topológicos, el campo inducido será proporcional a la matriz γ^3 , lo que significa que de manera efectiva, cada uno de los dos conos en la relación de dispersión notará un campo magnético de signo contrario, manteniéndose el sistema completo invariante bajo inversión espacial. En equilibrio, la corriente total será cero, lo que significará que la carga no se acopla al campo magnético, al menos en primer orden de teoría de perturbaciones[51]. Esta consideración explica el hecho de la anulación de la contribución a la densidad de estados asociada al campo gauge.

Por último, comentaremos que el valor máximo de la corrección a la densidad de estados se concentra en torno al tamaño típico de la corrugación, por lo que en un experimento de STM, las modificaciones más altas a la densidad de estados deberán estar en correspondencia con la morfología de la superficie.

4.6 Conclusiones.

En el presente capítulo, hemos planteado un formalismo alternativo al modelo de fermiones de Dirac en presencia de campos gauge, estudiado en el capítulo anterior. Dicho formalismo, consistente en el estudio de dichos fermiones en un espacio curvo junto con los campos gauge mencionados generaliza y complementa el modelo de campos gauge, pudiéndose analizar disposiciones de defectos para las cuales el mero modelo de campos es sospechoso. Hemos calculado perturbativamente las correcciones a la densidad de estados local para varias disposiciones de defectos, algunos de ellos de relevancia física, como el defecto Stone-Wales, para el cual el modelo de campos gauge no da corrección alguna.

Las corrugaciones en grafeno pueden tener más orígenes aparte de los defectos topológicos. En la última parte de este capítulo, hemos aplicado el modelo de espacios curvos a la situación de una lámina de grafeno con curvatura suave. Hemos calculado las correcciones a la densidad de estados válidas para corrugaciones con simetría axial, aunque hayamos tomado como referencia una corrugación con forma gaussiana. Junto con oscilaciones características, hemos encontrado que el campo gauge asociado a la curvatura no contribuye a estas correcciones de la densidad de estados, al menos a primer orden en teoría de perturbaciones, como era de esperar.

Capítulo 5

Desorden topológico y transporte en grafeno.

5.1 Introducción. Situación experimental.

En muestras experimentales de tamaños típicos del orden de unas cuantas micras, el desorden, independientemente de su origen, puede jugar un papel relevante en algunas de las propiedades físicas del sistema. En muestras de ese tamaño, la variedad de formas de distribuirse dicho desorden sobre la muestra es enorme. Esto hace que cuando se mida sobre diferentes muestras, encontremos magnitudes que varíen de muestra a muestra de manera aleatoria; magnitudes que, aún variando entre muestras, presenten un patrón que puede ser estudiado en forma de ley física; y por último magnitudes que tienen un carácter universal, independiente de cual muestra se esté analizando. Para estas dos últimas categorías hay que establecer un modelo para el desorden en el que la distribución concreta de defectos sobre la muestra sea irrelevante. A menudo el desorden puede describirse por medio de un potencial $V(\mathbf{r}, \mathbf{r}_\alpha)$ que depende explícitamente de las posiciones \mathbf{r}_α de los defectos. El formalismo a utilizar debe permitirnos calcular observables independientes de \mathbf{r}_α pero dependientes de unos pocos parámetros que caractericen el tipo de desorden, y eventualmente, la densidad de defectos presente.

Desde las primeras observaciones experimentales sobre conductividad realizadas sobre muestras de grafeno[52, 53], una de las propiedades más sorprendentes y que más atención ha recibido es la obtención de un valor mínimo finito, del orden del cuanto de conductancia $\sim 4e^2/h$. La observación más robusta en situación de medio llenado parece ser independiente de la temperatura en un amplio rango de temperatura. Otro hecho a destacar es la dependencia de la conductividad con el potencial de puerta aplicado, o lo que es lo mismo, con la densidad de portadores. En las primeras observaciones experimentales, se observaba un comportamiento lineal con dicha densidad de portadores, salvo, como hemos mencionado antes, en situación de medio

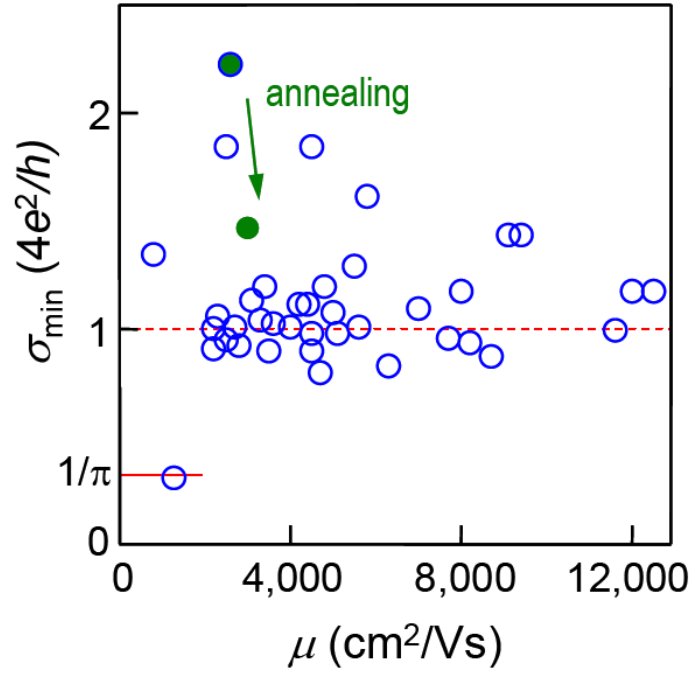


Figura 5.1: Conductividad mínima en el grafeno. En esta figura se muestra el valor de la conductividad en torno al punto de neutralidad de carga, como función de la movilidad de los portadores μ , para diferentes muestras. La mayoría de las muestras muestran un valor de σ_{min} en torno al valor $4e^2/h$, salvo en dos casos (de aproximadamente 50). La muestra marcada en color verde mostró inicialmente un valor anormalmente alto de σ_{min} , que, tras calentamiento a $400K$, adquirió un valor próximo al valor medio. Por otra parte, solamente el valor teórico $4e^2/\pi h$, predicho por la mayor parte de las teorías de transporte en grafeno fue obtenido para una muestra.

llenado $n \sim 0$, para la que se alcanza el valor $\sigma \sim 4e^2/h$. Más tarde, se comprobó que el comportamiento lineal de la conductividad con la densidad de portadores no es universal en grafeno, dependiendo por ejemplo, de la geometría [55, 56] o del tipo de impurezas en la muestra[54].

Desde que se publicaron los primeros datos experimentales (e incluso antes) que sugerían un valor mínimo universal en ausencia de portadores, se ha realizado un gran esfuerzo teórico para tratar de entender dicho fenómeno[57, 58, 56, 59, 60, 61, 62, 63, 64].

Es interesante observar que, en el régimen balístico, es decir, en ausencia de interacciones y desorden, teóricamente se espera un valor finito y universal de la conductividad, en contraposición a lo que se espera para un gas de electrones bidimensional usual. El concepto clave para entender este hecho es el llamado “Zitterbewegung”[58].

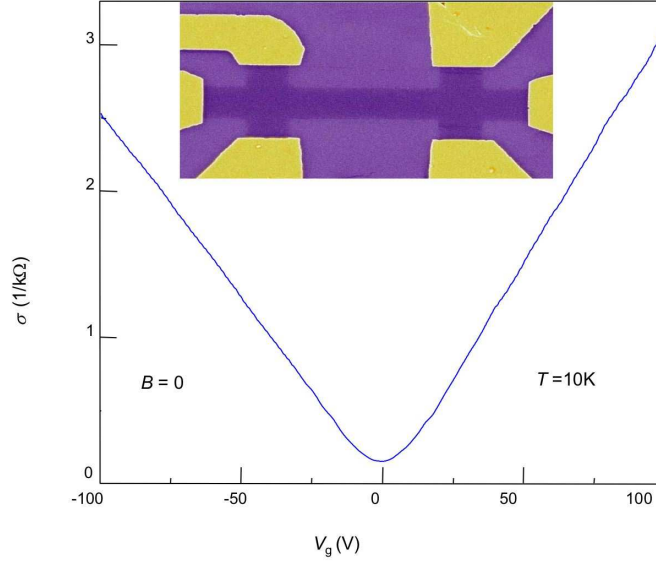


Figura 5.2: Variación de la conductividad con el potencial de puerta V_g en ausencia de campo magnético. Se puede apreciar el mínimo en la conductividad σ_{min} a voltajes de puerta cercanos a cero. El comportamiento en forma de V que presenta la figura anterior no es universal, variando de muestra a muestra de un comportamiento lineal a sublineal. Este hecho se considera que está relacionado con la naturaleza de las impurezas en la muestra[54]. En la figura interior se muestra una imagen de microscopía de efecto túnel de una muestra típica de tamaño cercano a la micra.

Este fenómeno fue propuesto por primera vez por E. Schrödinger en los años 30 en su análisis de las soluciones en forma de paquetes de onda de la ecuación de Dirac. La idea clave subyacente al “Zitterbewegung” es la no conmutatividad del operador corriente con el hamiltoniano de Dirac, lo que se traduce en que la corriente no se conserva con el tiempo. El mero hecho de la no conservación de la corriente implica que las correlaciones entre valores de la corriente a diversos tiempos produzcan un valor finito en la conductividad, tal y como se deduce de la fórmula de Kubo. Como se puede ver, empleando la fórmula (A.13) del apéndice A, junto con el valor a orden árbol del tensor polarización para el grafeno[65],

$$K_{xx} = \frac{8e^2}{\hbar} \sqrt{\omega^2 - v_F^2 k^2},$$

obtenemos el valor universal $\sigma_{min} = \frac{4e^2}{\hbar}$.

Muy recientemente, han surgido trabajos en los que se considera la posibilidad de

que la conductividad mínima no sea universal, dependiendo, entre otros parámetros, de la densidad de desorden. Por ejemplo, en la referencia [54] se especula con la posibilidad de que la naturaleza de las impurezas sea determinante a la hora de determinar el valor de la conductividad mínima y de la forma de la conductividad como función del voltaje de puerta. En esta línea de razonamiento, se ha investigado con más detalle el papel de las impurezas cargadas situadas en el sustrato, en la situación en la que el potencial químico está lejos del punto de Dirac. En este caso, se obtiene, tanto teórica como experimentalmente[66, 67] un valor para la conductividad proporcional al cociente entre la densidad de portadores n y la densidad de impurezas n_{imp} : $\sigma_{min} \sim \frac{n}{n_{imp}}$. El escenario anterior se puede generalizar a la situación en la que el voltaje externo se sustituye por un sustrato cargado[68] que genera fluctuaciones en la densidad de portadores, encontrándose que el valor de la conductividad es de nuevo no universal, y verificándose la ley de escala anterior, donde el papel de densidad de impurezas lo juega la fluctuación de carga δn inducida por el sustrato.

Exceptuando el trabajo de Nomura y MacDonald[54], todos los resultados anteriores están basados en la presencia de una densidad de portadores en la muestra, ya sea inducida por la aplicación de un voltaje de puerta externo o generada por la presencia de impurezas cargadas en el sustrato. Una de las preguntas que nos vamos a hacer en este capítulo es qué cabe esperar en cuanto a la universalidad del valor de la conductividad mínima en presencia de desorden topológico, donde la densidad de portadores es inicialmente nula y no existe un mecanismo externo que induzca densidad de portadores en el grafeno, tal y como pasa con las impurezas cargadas. Un resultado interesante al que llegaremos es que, al menos a nivel semiclásico, el valor de la conductividad mínima no es universal, y depende inversamente de la densidad de desorden, $\sigma_{min}^{(0)} \sim \frac{1}{n_{imp}}$, comportamiento típico de los sistemas difusivos.

5.2 El modelo.

En esta sección vamos a recordar brevemente el modelo propuesto para estudiar el efecto del desorden topológico sobre la estructura electrónica del grafeno.

Como hemos visto, un defecto topológico consiste en la substitución de un anillo hexagonal por un anillo poligonal de n lados, donde n es distinto de 6. Para definir mejor el modelo, nos vamos a centrar en pentágonos y heptágonos, que son los defectos que se pueden encontrar con mayor probabilidad en muestras reales.

En el capítulo anterior vimos que la inclusión de dichos defectos sobre una muestra plana de grafeno genera dos tipos de efectos: curvatura local, e introducción de fases extra de tipo Aharonov-Bohm.

Sin despreciar el efecto de dichas fases extra, cuya presencia genera efectos muy interesantes sobre la estructura electrónica [9, 30, 33, 69], en el presente capítulo nos vamos a centrar en los efectos que la curvatura induce sobre la estructura electrónica de la lámina de grafeno curvada, siguiendo el modelo de fermiones de Dirac en espacios

curvos descrito en los capítulos anteriores. Vamos a describir la situación realista en la que el número de defectos pentagonales y heptagonales es el mismo. Esta condición nos permite, primero, asegurar la planaridad asintótica de la muestra, es decir, vamos a permitir que la muestra se curve localmente en puntos arbitrarios, pero que a gran escala no se separe en manera apreciable de la situación plana, y segundo, hacer que, de entrada, una de las fases extra que inducen estos defectos, concretamente la fase que da cuenta de la mezcla de los puntos de Fermi o valles asociada a la matriz τ_2 , sea nula.

La segunda fase, relacionada con la no conmutatividad de los operadores de las holonomías de traslación y de mezcla de valles, va asociada con la matriz $\tau_3 \otimes 1$, está acompañada por un parámetro η que puede tomar los valores $\pm\frac{1}{3}$ y 0. Supondremos que dicho parámetro η es nulo. Esto hace que los resultados que obtengamos no sean totalmente generales. Sin embargo, la inclusión en el modelo de estos campos gauge que no consideramos puede realizarse de forma sencilla, puesto que, al ser formalmente similares al campo gauge asociado a la conexión de espín, tras el promedio sobre desorden generará un término de interacción de tipo corriente-corriente.

En el capítulo anterior también vimos la forma de obtener la métrica de un conjunto de defectos, modificando la métrica de un único defecto cónico, a través de una transformación de coordenadas. En esta ocasión vamos a obtener la métrica a través de la dinámica de los defectos en la superficie curva. Esta forma de obtener el tensor métrico tiene la ventaja de permitirnos calcular correladores del factor conforme en distintos puntos de la superficie. Este tensor métrico, en coordenadas conformes, se escribe como:

$$g_{ij}(\mathbf{r}) = e^{\Lambda(\mathbf{r})} \delta_{ij}. \quad (5.1)$$

Las ecuaciones que describen la dinámica de los defectos se reducen a única ecuación para el factor conforme $\Lambda(\mathbf{r})$:

$$\nabla^2 \Lambda(\mathbf{r}) = \sum_j^N \mu_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j), \quad (5.2)$$

cuya solución en coordenadas conformes es

$$\Lambda(\mathbf{r}) = \sum_j^N \frac{\mu_j}{2\pi} \log \left| \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}_j}{a^*} \right| \quad (5.3)$$

El parámetro μ_j está relacionado con el ángulo de defecto o exceso presente en el defecto y toma los valores $\mu = \pm\frac{1}{6}$, siendo el valor positivo para pentágonos y negativa para heptágonos. a^* es una constante del orden de la constante de red, que se puede interpretar como el radio del núcleo del defecto. El valor de μ permite desarrollar en serie los términos dependientes de μ en el hamiltoniano curvo (4.13) a través de (5.3). La dependencia explícita de los diferentes términos que aparecen en (4.13)

con el factor conforme $\Lambda(\mathbf{r})$ se ha deducido en el capítulo anterior. El hamiltoniano resultante es:

$$H = iv_F \int d^2\mathbf{r} [(1 + \Lambda(\mathbf{r}))\bar{\psi}\gamma^i\partial_i + \frac{i}{2}\bar{\psi}\gamma^i(\partial_i\Lambda(\mathbf{r}))\psi]. \quad (5.4)$$

En la ecuación (5.4) aparecen dos términos extra con respecto a la situación plana. El primer término representa una modificación local de la velocidad de Fermi inducida por la curvatura de la superficie. El segundo representa un campo magnético efectivo $A_i \sim \partial_i\Lambda(\mathbf{r})$.

Estos términos de desorden son dependientes de las posiciones concretas \mathbf{r}_j de los defectos. En el capítulo anterior vimos que la densidad de estados local se puede modificar en un sistema con un conjunto pequeño de defectos. En este caso, nos va a interesar la situación en la que, en un sistema idealmente infinito, se ha introducido un conjunto infinito de defectos, caracterizado por una densidad n_{imp} . Además, como hemos mencionado en la introducción, las propiedades de transporte no deben depender de la distribución concreta de defectos. En la siguiente sección estudiaremos la manera de construir funciones de transporte promediando sobre la distribución de defectos.

5.3 Promedio sobre desorden.

Definamos la función generatriz \mathcal{Z} de un sistema de campos fermiónicos ψ y $\bar{\psi}$: como la integral de camino

$$\mathcal{Z}[\Lambda] = \int D\bar{\psi}\psi e^{-H_D - \int d\mathbf{r} J(\mathbf{r})\Lambda(\mathbf{r})}. \quad (5.5)$$

El valor esperado de un cierto observable \mathcal{O} puede obtenerse por medio de derivación funcional de la función generatriz 5.5:

$$\mathcal{O} = \frac{\delta^n}{\delta J^n} \Big|_{J=0} \ln \mathcal{Z}[\Lambda, J], \quad (5.6)$$

donde hemos definido la función generatriz a través de la integral de camino de los campos

donde H_D se definió en (5.4), y en general, \mathcal{O} será un funcional de $\Lambda(\mathbf{r})$.

El promedio sobre desorden se puede definir como

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{dis} = \int D\Lambda e^{-H_\Lambda(\mathcal{O})}. \quad (5.7)$$

Para darle carácter operacional a la definición (5.7) es necesario tener una acción para $\Lambda(\mathbf{r})$. En la mayoría de los trabajos sobre desorden, simplemente se considera

la función que define el desorden $V(\mathbf{r})$ como una variable estadística con un valor promedio nulo $\langle V \rangle_{dis} = 0$ y una varianza finita,

$$\langle V(\mathbf{r})V(\mathbf{r}') \rangle_{dis} = \Delta \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Toda la información sobre la densidad de desorden está contenida en el parámetro adimensional Δ . En nuestro caso, podemos hacer una interpretación un poco diferente del desorden y determinar unas propiedades similares a partir de lo que sabemos de la “dinámica” de los defectos topológicos.

Cuando definimos la función $\Lambda(\mathbf{r})$, vimos que satisfacía la ecuación no homogénea (5.2), en donde la curvatura $S(\mathbf{r}) = \sum_j^N \mu_j \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_j)$ es el término independiente. La solución de (5.2) se puede escribir formalmente mediante la función de Green $K(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ como:

$$\Lambda(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' S(\mathbf{r}, \mathbf{r}_j) K(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (5.8)$$

donde K es

$$K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \log \left| \frac{\mathbf{r} - \mathbf{r}'}{a^*} \right|. \quad (5.9)$$

Esto nos permite definir una acción H_Λ para $\Lambda(\mathbf{r})$ a partir de $K(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$:

$$H_\Lambda = \frac{1}{2n_{imp}a^*} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \Lambda(\mathbf{r}) K^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \Lambda(\mathbf{r}'). \quad (5.10)$$

Es importante notar el término adimensional $n_{imp}a^*$ en la definición de H_Λ , que jugará el mismo papel que juega Δ en la definición estadística de desorden anteriormente mencionada.

En lo que sigue, vamos a trabajar en el espacio de momentos, en el cual H_D tiene la forma $((dp) \equiv \frac{d^2\mathbf{p}}{4\pi^2})$:

$$H_D = \frac{1}{4\pi n_{imp}a^{*2}} \int (dp) \Lambda(\mathbf{p}) p^2 \Lambda(-\mathbf{p}). \quad (5.11)$$

Con todo lo anterior podemos postular una varianza para la función $\Lambda(\mathbf{p})$ como:

$$\langle \Lambda(\mathbf{p}) \Lambda(-\mathbf{p}) \rangle = \frac{2\pi n_{imp}a^{*2}}{p^2}.$$

Una vez que tenemos definida la operación de promedio sobre desorden, retornemos a la definición de valor esperado de un observable \mathcal{O} como derivada variacional de $\ln \mathcal{Z}$, y su promedio sobre desorden:

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{dis} = \left\langle \frac{\delta^n}{\delta J^n} \Big|_{J=0} \ln \mathcal{Z} \right\rangle_{dis} \equiv \int D\Lambda e^{-H_D} \frac{1}{\mathcal{Z}[\Lambda, J=0]} \frac{\delta^n}{\delta J^n} \Big|_{J=0} \mathcal{Z}[\Lambda, J]. \quad (5.12)$$

La integral funcional es, en general, imposible de hacer, debido a que la función $\Lambda(\mathbf{r})$ aparece tanto en el numerador como en el denominador.

Este problema se puede solventar de tres maneras diferentes: supersimetría[70], la técnica de contornos de Keldysh[71] y el truco de las réplicas[72].

En el presente capítulo utilizaremos esta última técnica, consistente en modificar la función de partición \mathcal{Z} de tal manera que $\mathcal{Z}[\Lambda, J = 0] = 1$ pero manteniendo la definición (5.12) intacta.

La base de esta técnica está en la serie de igualdades formales

$$\ln \mathcal{Z} = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{1}{R} (e^{R \ln \mathcal{Z}} - 1) = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{1}{R} (\mathcal{Z}^R - 1),$$

que permiten escribir (5.12) como

$$\langle \mathcal{O} \rangle_{dis} = \lim_{R \rightarrow 0} \frac{1}{R} \frac{\delta^n}{\delta J^n} \langle \mathcal{Z}^R \rangle_{dis}. \quad (5.13)$$

El resultado formal es que se puede realizar el cálculo de $\langle \mathcal{O} \rangle_{dis}$ calculando \mathcal{Z}^R en vez del logaritmo de \mathcal{Z} . El cálculo de \mathcal{Z}^R no conlleva ningún problema, ya que, en términos de integral de camino,

$$\mathcal{Z}^R = \left(\int e^{-H} \right)^R = \int e^{-\sum_R H_R},$$

y el promedio sobre desorden se hace ahora en una exponencial cuyo exponente depende linealmente de $\Lambda(\mathbf{r})$. El nombre de truco de réplicas procede del hecho de haber “replicado” la acción R veces en la exponencial de la integral de camino. Hemos pasado de trabajar con un conjunto de campos fermiónicos $(\bar{\psi}, \psi)$ a trabajar con R especies de campos $(\bar{\psi}_R, \psi_R)$, promediados sobre R . Al final del cálculo se tomará el límite $R \rightarrow 0$.

El último paso entonces es el cálculo de

$$\langle \mathcal{Z}^R \rangle_{dis} = \int D\Lambda e^{-H_\Lambda} \mathcal{Z}^R.$$

Empleando (5.5) expresada en el espacio de momentos, calculando \mathcal{Z}^R con (5.4) y realizando la integración funcional sobre $\Lambda(\mathbf{p})$, obtenemos el siguiente hamiltoniano de “interacción”:

$$H = H_0 + v_F^2 \frac{\lambda}{2} \sum_{a,b}^R \int (dk)(dk') \Gamma(k, k') (\bar{\psi}_a \gamma^i \psi_a) (\bar{\psi}_b \gamma_i \psi_b), \quad (5.14)$$

donde $\lambda = 2\pi\mu^2 n_{imp} a^{*2}$ y la suma es sobre índices de réplica a y b . H_0 es el hamiltoniano libre usual

$$H_0 = \int dk \bar{\psi}_a (\omega \gamma^0 - v_F \gamma k + i\eta M) \psi_a, \quad (5.15)$$

Tanto en (5.14) como en (5.15) hemos definido dos tipos de campos fermiónicos: campos *avanzados*, para los cuales el parámetro η es positivo en (5.15), y campos

retardados, donde η es negativo. En presencia de estos dos tipos de campos, y para $\eta = 0$ en (5.15), el hamiltoniano (5.14) posee una simetría $O(2N)$. Cuando se introduce el término asociado a η , dicha simetría se rompe y pasa a ser $O(N) \times O(N)$. Tal y como se explica en la referencia [73], esta ruptura explícita de simetría genera modos Goldstone, que como veremos más adelante, se interpretan como los modos de difusión del sistema. La matriz M se define, por tanto, como

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}_{2N}. \quad (5.16)$$

En toda la discusión que se sigue, nos centraremos en estudiar lo que sucede al nivel de Fermi, es decir, a $\omega = 0$.

La función $\Gamma(k, k')$ tiene la expresión

$$\Gamma(k, k') = \left(\frac{(k + k')^2}{(k - k')^2} - \frac{1}{4} \right). \quad (5.17)$$

El segundo término en $\Gamma(k, k')$ procede de la integración funcional del potencial vector en (5.4). Dicha integración se ha realizado fácilmente en el espacio de momentos, donde $\partial_i \Lambda(\mathbf{r}) \rightarrow k_i \Lambda(\mathbf{k})$. El correlador para el campo magnético efectivo $A_i \sim \partial_i \Lambda$ ([74]) se ha tomado como

$$\langle A_i(\mathbf{p}) A_j(-\mathbf{p}) \rangle = \delta_{ij} 2\pi n_{imp} a^{*2}.$$

Así pues, el término correspondiente al campo magnético efectivo genera un término de correlación de corto alcance, mientras que el primer término de $\Gamma(k, k')$, procedente del promedio del término que modifica localmente la velocidad de Fermi, es un término anisótropo y fuertemente divergente en el límite de *dispersión hacia delante*: $\mathbf{k}' \rightarrow \mathbf{k}$. Esta divergencia procede del correlador $\langle \Lambda(\mathbf{p}) \Lambda(-\mathbf{p}) \rangle$ a momentos pequeños, o, equivalentemente, a distancias muy largas. Vamos a regularizar esta divergencia en (5.17) por medio de un *cutoff* δ :

$$\Gamma(k, k') = \left(\frac{(k + k')^2}{(k - k')^2 + \delta^2} - \frac{1}{4} \right). \quad (5.18)$$

Podemos darle un significado físico a δ . Si en vez de considerar un propagador de largo alcance para los defectos que se comporta como $\frac{1}{p^2}$, consideramos un propagador del tipo

$$K(p) \sim \frac{1}{p^2 + \delta^2}, \quad (5.19)$$

que corresponde, en el espacio real, a cambiar el logaritmo en (5.9) por la función de Bessel modificada de segunda especie:

$$K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \mathbf{K}_0(\delta |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (5.20)$$

El término dominante en el desarrollo en serie de (5.20) para pequeños valores de δ es

$$K(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \approx \log(\delta |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (5.21)$$

Podemos interpretar entonces δ como el inverso de la distancia χ sobre la cual dos defectos topológicos dejan de estar correlacionados.

Aunque hayamos encontrado un término de interacción de cuatro fermiones tras promediar sobre $\Lambda(\mathbf{p})$, hay que recordar que estamos tratando con un problema de dispersión elástica de electrones, en el cual los módulos de los momentos de los estados entrante y saliente tras un proceso de dispersión por una impureza se conservan. En virtud de esta conservación de momento, la expresión (5.18) no es función del módulo de los momentos, definiendo la diferencia de ángulos de incidencia y salida $\phi \equiv \theta_k - \theta_{k'}$, y $\hat{\delta}^2 \equiv \frac{\delta^2}{k^2}$, encontramos

$$\Gamma(\phi) = \left(\frac{\cos^2(\phi/2)}{\sin^2(\phi/2) + \hat{\delta}^2} - \frac{1}{4} \right). \quad (5.22)$$

Podemos asumir, además, que los momentos involucrados en nuestro problema están en un pequeño entorno de los puntos de Dirac, por lo que podemos suponer que $1/k$ es del orden de la longitud de onda λ de dichos estados (o la longitud de correlación, si estuvieran localizados). Por lo tanto podemos estimar $\hat{\delta}$ del orden de λ/χ , siendo χ comparable con el tamaño del sistema L . Estas hipótesis no son suficientes para caracterizar bien $\hat{\delta}$, siendo por tanto un parámetro incontrolable en nuestra teoría. Solamente realizaremos la hipótesis de que $\chi > \lambda$. A pesar de ello, veremos que la conductividad Drude calculada resulta ser independiente de este parámetro, y por lo tanto, bien definida.

Para concluir esta sección, vamos a descomponer $\Gamma(\phi)$ en armónicos,

$$\Gamma(\phi) = \sum_n \Gamma_n e^{-in\phi} = \sum_n \Gamma_n \chi_n^*(\hat{k}) \chi_n(\hat{k}'), \quad (5.23)$$

donde, por conveniencia, hemos definido $\chi_n(\hat{k}) = e^{in\theta_k}$. Esta descomposición es de enorme utilidad, ya que nos va a permitir determinar qué canales de la interacción (5.14) van a ser los que realmente van a contribuir en el cálculo de la conductividad. Además, nos permite comparar nuestro modelo, que tiene múltiples canales de dispersión, con modelos de corto alcance, en los cuales la dispersión ocurre únicamente en el canal s .

Adelantando acontecimientos, vamos a encontrar que solamente los modos con $n = 0$ y $n = \pm 1$ contribuyen al proceso de difusión electrónica. Los valores explícitos de los coeficientes Γ_n para estos valores de n son ($\Gamma_{-n} = \Gamma_n$):

$$\Gamma_0 = \frac{1}{\delta} - 5/4 + O(\delta) \quad , \quad \Gamma_1 = \frac{1}{\delta} - 2 + O(\delta). \quad (5.24)$$

5.4 Aproximación de campo medio. El modelo σ no lineal.

En esta sección vamos a construir la teoría de campos de baja energía que describe el comportamiento a escalas muy grandes del sistema, es decir, a muy grandes longitudes de onda[75].

Sustituyendo la descomposición en armónicos en el hamiltoniano de interacción (5.14) tenemos:

$$H_{int} = v_F^2 \frac{\lambda}{2} \sum_{a,b} \int (dk)(dk') \sum_n \Gamma_n \chi_n^*(\hat{k}) \chi_n(\hat{k}') (\bar{\psi}_a \gamma^i \psi_a) (\bar{\psi}_b \gamma_i \psi_b), \quad (5.25)$$

con $\lambda = 2\pi\mu^2 n_{imp} a^{*2}$. Podemos transformar la interacción corriente-corriente (5.25) en una interacción de tipo densidad-densidad aplicando una identidad de Fierz[76]:

$$(\bar{\psi}_1 M \psi_2) (\bar{\psi}_3 N \psi_4) = \sum_i (\bar{\psi}_1 B_i \psi_4) (\bar{\psi}_3 M B_i N \psi_2), \quad (5.26)$$

donde M y N son matrices genéricas de $SU(2)$ y $B_i = \{1, \gamma_1, \gamma_2, \gamma_5\}$ es una base de matrices de $SU(2)$.

El hamiltoniano (5.25) se escribe, entonces, como

$$H_{int} = -v_F^2 \frac{g}{2} \sum_{a,b} \int (dk)(dk') \sum_n \Gamma_n \chi_n^*(\hat{k}) \chi_n(\hat{k}') \left[(\bar{\psi}_a \psi_b) (\bar{\psi}_b \psi_a) - (\bar{\psi}_a \gamma_5 \psi_b) (\bar{\psi}_b \gamma_5 \psi_a) \right], \quad (5.27)$$

donde hemos definido $g = 2\lambda$. Es interesante notar que el hamiltoniano de interacción, tanto en la forma (5.25) como en (5.27), es invariante bajo transformaciones globales *continuas* $U_\chi(1)$ *quirales*, en contraste con una interacción de tipo $(\bar{\psi}_a \psi_b)^2$ ([77]), genuina de un problema de dispersión elástica isótropa de fermiones, que es invariante bajo $U_\chi(1)$ *discreta*. Pese a esta diferencia, veremos que en ambos casos es posible encontrar una solución de campo medio que rompa esta simetría, tanto en el caso continuo como en el discreto.

Podemos desacoplar la interacción efectiva de cuatro fermiones(5.27) por medio de una transformación de Hubbard-Stratonovitch

$$H_{int} = \int (dk) \frac{1}{4gv_F^2} \left[\sum_n \Gamma_n (Q_n^2 + \Pi_n^2) + i \sum_n \Gamma_n \chi_n(\hat{k}) \bar{\psi}_a (Q_n - i\gamma_5 \Pi_n) \psi_b \right]. \quad (5.28)$$

Los campos Q_n^{ab} y Π_n^{ab} son campos auxiliares matriciales de dimensión $2N$, debido a que hemos definido campos fermiónicos retardados y avanzados. Podemos simplificar los cálculos que vienen a continuación realizando una transformación unitaria que diagonaliza el hamiltoniano libre (5.15) y deja inalterada la medida de integración funcional: $\bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi} U^+$, $Q_n \rightarrow U Q_n U^+$, $\Pi_n \rightarrow U \Pi_n U^+$, $\gamma_5 \rightarrow U \gamma_5 U^+$. Sin pérdida de generalidad, renombraremos los campos transformados como los originales.

Escribiendo la integral de camino $\langle \mathcal{Z}^R \rangle_{dis}$ en función de los campos auxiliares Q_n^{ab} y Π_n^{ab} e integrando los campos fermiónicos $(\bar{\psi}, \psi)$, obtenemos la siguiente acción efectiva:

$$H_{eff} = \int Tr \ln G^{-1} - \frac{1}{4gv_F^2} \sum_n \Gamma_n (Q_n^2 + \Pi_n^2), \quad (5.29)$$

donde hemos definido G como

$$G^{-1} = G_0^{-1} + i\eta M + i \sum_n \Gamma_n \chi_n(\hat{k}) (Q_n - i\gamma_5 \Pi_n), \quad (5.30)$$

y

$$G_0^{-1} = \begin{pmatrix} v_F k & 0 \\ 0 & -v_F k \end{pmatrix} \otimes \mathbf{1}_{2N}. \quad (5.31)$$

La integral de camino escrita en términos de los campos auxiliares, estará dominada por las configuraciones de los campos Q_n^{ab} y Π_n^{ab} cercanos a la solución de campo medio, definida a partir de las ecuaciones de punto de silla para dichos campos,

$$\frac{\delta H_{eff}}{\delta \langle Q_n \rangle} = 0, \quad \frac{\delta H_{eff}}{\delta \langle \Pi_n \rangle} = 0.$$

Es fácil comprobar que las ecuaciones anteriores pueden agruparse en un único conjunto de ecuaciones para los campos compuestos $S_n = Q_n - i\gamma_5 \Pi_n$, verificándose que $S_n^2 = S_n^+ S_n = Q_n^2 + \Pi_n^2$, en virtud de las reglas de conmutación de los campos Q_n^{ab} y Π_n^{ab} . La ecuación $\frac{\delta H_{eff}}{\delta \langle S_n \rangle} = 0$ se escribe como

$$\frac{1}{2gv_F^2} \langle S_n \rangle = \int (dk) \frac{\chi_n(\hat{k})}{G_0^{-1} + i\eta M + i \sum_n \Gamma_n \chi_n(\hat{k}) \langle S_n \rangle}. \quad (5.32)$$

Siguiendo la referencia [78], consideraremos como solución de prueba para estas ecuaciones

$$\langle S_n \rangle = f \delta_{n0} M. \quad (5.33)$$

donde f es una función a determinar. En el límite $\eta \rightarrow 0$, dicha función tiene la forma

$$f = \frac{v_F K}{\Gamma_0} \left(e^{\frac{2\pi}{g\Gamma_0}} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.34)$$

expresión en la que hemos tenido que introducir un momento de corte ultravioleta K . Ahora se pone de manifiesto el hecho de tener una solución que rompa la simetría $U_\chi(1)$ continua, ya que la solución (5.33) no fija de manera unívoca las soluciones para $\langle Q_0 \rangle$ y $\langle \Pi_0 \rangle$. Podemos elegir entonces aquella solución en la que $\langle Q_0 \rangle = fM$ y $\langle \Pi_0 \rangle = 0$.

Una vez elegida una solución de campo medio (5.33), el tiempo de vida media o tiempo de relajación de una partícula se define como

$$\frac{1}{2\tau} \equiv v_F K \left(e^{\frac{2\pi}{g\Gamma_0}} - 1 \right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (5.35)$$

resultando ser una constante, y con una dependencia con la densidad de defectos típicamente no perturbativa: $\tau^{-1}(g) \sim \exp(1/g)$. Este valor de la vida media depende de ambos regularizadores, K y $\hat{\delta}$. La dependencia con K puede ser eliminada por medio de técnicas de grupo de renormalización [57], técnica que no se puede aplicar para eliminar la dependencia con $\hat{\delta}$. Las propiedades de una partícula, como la vida media (5.35) y, como veremos a continuación, la densidad de estados, fuertemente dependen de dicho parámetro.

La densidad de estados promedio en el nivel de Fermi puede calcularse a través de la expresión

$$\rho(0) = \lim_{R \rightarrow 0} -\frac{1}{R} \text{Im} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{4\pi^2} G^R(\mathbf{k}). \quad (5.36)$$

$G^R(\mathbf{k})$ es la parte retardada ($\eta = -1$) de la función de Green (5.30). En función de la vida media, $\rho(0)$ se escribe como

$$\rho(0) = \frac{1}{g\Gamma_0 v_F^2} \frac{1}{2\tau}. \quad (5.37)$$

La densidad de estados finita (5.37) nos va a permitir utilizar la substitución usual

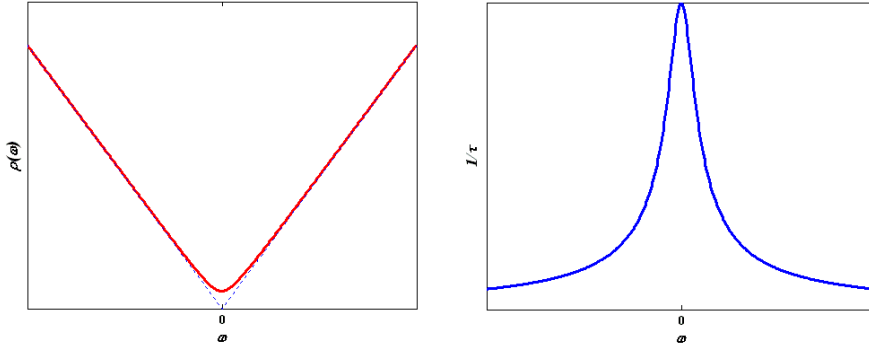


Figura 5.3: Densidad de estados e inversa de la vida media como función de la energía. El valor de la densidad de estados escala con $\delta^{1/2}$, mientras que $1/\tau$ escala con $1/\delta^{1/2}$.

para la integración de momentos en gases de electrones bidimensionales de hamiltoniano parabólico:

$$\int \frac{d^2 k}{4\pi^2} \rightarrow \rho(0) \int d\epsilon_k, \quad v_F k \rightarrow \epsilon_k.$$

Esta substitución tendrá efectos no triviales, ya que, en el caso de tener grafeno perfecto, la densidad de estados escala con la energía, como ya sabemos, de la siguiente manera $\rho_0(\omega) \sim |\omega|$, impidiendo en general utilizar la substitución anterior.

Antes de calcular las fluctuaciones cuánticas en torno a la solución de simetría quiral rota, debemos hacer otro comentario. La ecuación (5.32) admite otra solución,

aparte de la definida por las ecuaciones (5.33) y (5.34), que es $\langle S_n \rangle = 0$, y que corresponde a la fase donde la simetría no está rota. La densidad de estados correspondiente a esta solución se hace nula en el nivel de Fermi, y eventualmente tendría la forma, en función de la energía, de $\rho(\omega) \sim |\omega|^\alpha$, siendo α una función de g [60].

Para determinar cual de las dos soluciones es de menor energía, calculamos el potencial efectivo como función de f . El potencial efectivo V_{eff} calculado es el mismo que el correspondiente al modelo de Nambu-Jona Lasinio [79], tomando la expresamente $\langle \Pi_0 \rangle$ cero:

$$V_{eff} = \frac{1}{4gv_F^2} f^2 + \frac{f^2}{4\pi} \left(\log \left(\frac{f^2}{K^2} \right) - 1 \right). \quad (5.38)$$

La solución $f = 0$, a la que corresponde un valor para el potencial $V_{eff} = 0$ resulta ser un máximo, mientras que la solución $f \sim e^{\frac{-\pi}{g}}$ es efectivamente un mínimo, y corresponde al valor $V_{eff} = -\frac{K^2}{4\pi} f^2$. Por lo tanto, tiene sentido calcular las correcciones al valor de punto de silla de la integral de camino en torno a la solución (5.34).

Podemos desarrollar Q_n y Π_n en torno a sus valores de campo medio $Q_n = \langle Q_n \rangle + \delta Q_n$ y $\Pi_n = \langle \Pi_n \rangle + \delta \Pi_n$ en (5.29) y escribir

$$H_{eff} \approx \langle H_{eff} \rangle + \delta Q_n \frac{\delta^2 H_{eff}^*}{\delta Q_n \delta Q_m} \delta Q_m + (Q_{n,m} \leftrightarrow \Pi_{n,m}). \quad (5.39)$$

El símbolo $*$ significa que la derivada variacional de H_{eff} está evaluada en los valores de los campos en la aproximación de punto de silla. En la ecuación (5.39) aparecerán términos cruzados de δQ_n y $\delta \Pi_m$, esas derivadas funcionales originan términos nulos, y por lo tanto los campos anteriores no se acoplan entre ellos. Efectivamente, las derivadas de los campos tienen la siguiente forma:

$$\begin{aligned} \delta Q_n \frac{\delta^2 S^*}{\delta Q_n \delta Q_m} \delta Q_m = & -\frac{1}{2} \sum_n \Gamma_n \delta Q_n^2 + \frac{1}{4} \int (dp)(dq) \sum_{n,m} \Gamma_n \Gamma_m \chi_p(k) \chi_m(p+q) \delta Q_n \\ & Tr G(k) G(p+q) \delta Q_m, \end{aligned} \quad (5.40)$$

y

$$\begin{aligned} \delta \Pi_n \frac{\delta^2 S^*}{\delta \Pi_n \delta \Pi_m} \delta \Pi_m = & -\frac{1}{2} \sum_n \Gamma_n \delta \Pi_n^2 - \frac{1}{4} \int (dp)(dq) \sum_{n,m} \Gamma_n \Gamma_m \chi_n(p) \chi_m(p+q) \delta \Pi_n \\ & Tr \gamma_5 G(p) \gamma_5 G(p+q) \delta \Pi_m. \end{aligned} \quad (5.41)$$

El término $\delta Q_n \frac{\delta^2 S^*}{\delta Q_n \delta \Pi_m} \delta \Pi_m$ es proporcional a $Tr G(p) \gamma_5 G(p+q)$ que no contribuirá al término de correlación de difusión correspondiente $\langle \delta Q(q) \delta \Pi(-q) \rangle$.

Las funciones espectrales se encuentran concentradas en torno a la energía de Fermi, por lo que podemos restringir la integración en la variable \mathbf{q} a valores en torno al nivel de Fermi, $q \ll K_F$, y hacer la aproximación $\chi_m(\mathbf{p} + \mathbf{q}) \approx \chi_m(\mathbf{p})$, produciendo un error despreciable mientras la integración sobre \mathbf{k} se realice en un

entorno muy pequeño alrededor de K_F . En la ecuación (5.40), la integral no nula para el producto $G^R G^A$, es decir, para el sector no diagonal δQ^{+-} , da lugar a un comportamiento de polo difusivo para los campos δQ_n . Por el contrario, empleando la propiedad de las funciones de Green $\gamma_5 G^{R,A} \gamma_5 = -G^{A,R}$, veremos que, en el caso de los modos $\delta \Pi_n$, el polo difusivo aparece en el producto $G^R G^R$ y su compañero avanzado-avanzado, indicándonos que el canal difusivo será el canal asociado a las partes diagonales $\delta \Pi^{++,--}$ de los campos $\delta \Pi_n$. El signo $-$ procedente de la simetría de G con γ_5 corrige el signo relativo de los segundos términos en el lado derecho de las ecuaciones (5.40) y (5.41).

Realicemos la integración en \mathbf{k} en la expresión (5.40). La misma integración se efectuará en (5.41), aplicando la relación entre G^R y G^A . Definamos la cantidad $C_{mn}(\eta, q)$ como

$$C_{mn}(\eta, q) = \frac{1}{4} \int (dp) \chi_n(p) \chi_m(p) \text{Tr} G^R(p) G^A(p+q). \quad (5.42)$$

con $\epsilon = \eta + \frac{1}{2\tau}$. La estructura diagonal de $G^{R,A}$, nos permite hacer uso de la relación

$$\text{Tr} G^R G^A = \text{Tr} \begin{pmatrix} \frac{1}{v_F p - i\epsilon} & 0 \\ 0 & \frac{1}{-v_F p - i\epsilon} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{v_F |\mathbf{p} + \mathbf{q}| + i\epsilon} & 0 \\ 0 & \frac{1}{-v_F |\mathbf{p} + \mathbf{q}| + i\epsilon} \end{pmatrix}. \quad (5.43)$$

Efectuando el producto y la traza, la expresión anterior queda

$$\text{Tr} G^R G^A = \frac{1}{v_F p - i\epsilon} \frac{1}{v_F |\mathbf{p} + \mathbf{q}| + i\epsilon} + \frac{1}{v_F p + i\epsilon} \frac{1}{v_F |\mathbf{p} + \mathbf{q}| - i\epsilon}. \quad (5.44)$$

Inmediatamente vemos que el primer término en el lado derecho de esta igualdad es el complejo conjugado del segundo término, y por tanto podemos escribir

$$\text{Tr} G^R G^A = 2\text{Re} \left(\frac{1}{v_F p - i\epsilon} \frac{1}{v_F |\mathbf{p} + \mathbf{q}| + i\epsilon} \right). \quad (5.45)$$

Como estamos interesados en el comportamiento de largas longitudes de onda de los campos δQ_n , desarrollaremos (5.45) en torno a pequeños valores de q .

El primer término de este desarrollo, C_{nm}^0 consiste en hacer $q = 0$ en (5.45) y hacer la substitución $d^2 \mathbf{k} \rightarrow \rho(0) d\epsilon_k$. El resultado es

$$C_{nm}^0 = \frac{1}{4} \rho(0) \delta_{-nm} \frac{1}{\eta + \frac{1}{2\tau}}, \quad (5.46)$$

o, desarrollando nuevamente en el límite $\eta \rightarrow 0$:

$$C_{nm}^0 = \frac{\delta_{-nm}}{4g v_F^2 \Gamma_0} - \frac{1}{4} \rho(0) \delta_{-nm} (2\tau)^2 \eta + O(\eta^2). \quad (5.47)$$

Podemos agrupar el término constante en (5.47) con el término proporcional a δQ_n^2 que aparece en (5.29) al desarrollar en torno a la solución de campo medio, originando un término de masa para los campos:

$$\mathcal{L}_m \equiv \frac{1}{4gv_F^2} \sum_n \Gamma_n \left(\frac{\Gamma_n}{\Gamma_0} - 1 \right) (\delta Q_n^2 + \Pi_n^2). \quad (5.48)$$

De este término de masa, vemos que únicamente los modos δQ_0 y $\delta \Pi_0$ son modos no masivos (los modos Goldstone producidos por la ruptura de la simetría $O(2N)$), y que serán los modos colectivos responsables del comportamiento difusivo del sistema, de igual manera que ocurre en los gases de electrones bidimensionales[78].

El siguiente término en el desarrollo de C_{nm} es

$$C_{nm}^1 = \frac{1}{4} \int (dp) e^{i(m+n)\theta} v_F q \cos \theta \left(\frac{-1}{(v_F p - i\epsilon)(v_F p + i\epsilon)^2} + \frac{1}{(-v_F p - i\epsilon)(-v_F p + i\epsilon)^2} \right). \quad (5.49)$$

Notemos que, en el caso de la dispersión de electrones isótropa y de corto alcance, este término es nulo debido a la integración angular. En nuestro caso, sin embargo, la presencia de la función $e^{m+n\theta}$ permite un término no nulo lineal en q , lo que originará un acoplo entre los modos masivos $\delta Q_{\pm 1}$ y el modo sin masa δQ_0 (y lo mismo para los modos $\delta \Pi_{\pm 1}$ y $\delta \Pi_0$). Cambiando la variable de integración y teniendo en cuenta que la integración angular es distinta de cero solamente para $n = -m \pm 1$, C_{nm}^1 puede escribirse como

$$C_{nm}^1 = \frac{1}{4} v_F q (\delta_{nm-1} + \delta_{nm+1}) \rho(0) \int d\varepsilon_p \frac{1}{(\varepsilon_p - i\epsilon)(\varepsilon_p + i\epsilon)^2}, \quad (5.50)$$

o, tras hacer $\eta = 0$ e integrar por residuos,

$$C_{nm}^1 = -\frac{v_F q}{4} \rho(0) (\delta_{nm-1} + \delta_{nm+1}) (2\tau)^2. \quad (5.51)$$

El término C_{nm}^1 , aunque es el más bajo en el desarrollo en \mathbf{q} , solamente da información del acoplo entre modos $n = \pm 1$ y $n = 0$. Para tener un término dependiente de \mathbf{q} para δQ_0 , tendremos que calcular el siguiente orden, C_{nm}^2 . Empleando los métodos anteriores, es fácil ver que este término se puede escribir como

$$C_{nm}^2 = \frac{1}{2} q^2 \text{Re} \int (dp) e^{i(m+n)\theta} \frac{1}{v_F p - i\epsilon} \left(\frac{\cos^2 \theta}{(v_F p + i\epsilon)^3} - \frac{\sin^2 \theta}{2v_F p (v_F p + i\epsilon)^2} \right). \quad (5.52)$$

La integración angular de (5.52) nos dice que habrá términos proporcionales a $\delta - nm \pm 2$ junto con términos proporcionales a δ_{nm} . Estas condiciones para n y m generarán términos de acoplo entre el modo δQ_0 y los modos masivos $\delta Q_{\pm 2}$, junto con el término buscado para δQ_0 . Al final del cálculo, vamos a integrar los términos masivos en la acción (5.29), quedándonos con una acción efectiva para los modos sin masa. La

integración de los modos $\delta Q_{\pm 2}$ generará un término de orden q^4 , despreciable frente a los términos de orden q^2 . El resultado para (5.52), teniendo en cuenta únicamente el término de δ_{nm} es

$$C_{nm}^2 = \frac{v_F^2 q^2}{8\pi} \delta_{-nm} \rho(0) (2\tau)^3. \quad (5.53)$$

Una vez obtenido el desarrollo para la función C_{nm} podemos escribir la acción total para los modos $\delta Q_{n=0,\pm 1}$:

$$\begin{aligned} \delta H_{eff} \approx & \int (dq) \frac{1}{4gv_F^2} \sum_{n \pm 1} \Gamma_n \left(\frac{\Gamma_n}{\Gamma_0} - 1 \right) \delta Q_n^2 - \frac{\rho(0)(2\tau)^2}{4} \Gamma_0^2 \delta Q_0 \left(\eta + \frac{v_F^2 (2\tau) q^2}{2\pi} \right) \delta Q_0 \\ & + \frac{\Gamma_1 \Gamma_0 \rho(0) v_F q (2\tau)^2}{4} (\delta Q_0 \delta Q_1 + \delta Q_0 \delta Q_{-1}), \end{aligned} \quad (5.54)$$

e integrar los modos masivos obteniendo, finalmente,

$$\delta H_Q = \int dq \delta Q_0 \frac{(2\tau) \Gamma_0}{4gv_F^2} (\eta + Dq^2) \delta Q_0. \quad (5.55)$$

D es la constante de difusión de los modos δQ_0 , renormalizada por la interacción de dichos modos con los modos masivos $\delta Q_{\pm 1}$. La expresión de D en términos de la densidad de estados en el nivel de Fermi es

$$D = \frac{1}{2\pi^2} \frac{1}{g\rho(0)} \frac{1}{\Gamma_0 - \Gamma_1}. \quad (5.56)$$

A partir de la constante de difusión D podemos definir el tiempo de transporte como $D = \frac{1}{2} v_F^2 \tau_{tr}$. La interpretación física es el tiempo que tarda un electrón inicialmente en un estado de momento \mathbf{k} en abandonar dicho estado. Esta constante D permitirá definir un recorrido libre medio l . Más adelante discutiremos la validez de nuestros resultados en función de este recorrido libre medio.

Finalmente podemos calcular el valor de la conductividad DC en aproximación semiclásica por medio de la relación de Einstein (ver apéndices):

$$\sigma_{DC} = 4 \frac{e^2}{\hbar} \rho(0) D = \frac{4e^2}{\hbar} 2 \frac{4}{3\pi g}. \quad (5.57)$$

El factor 4 en (5.57) procede de tener degeneraciones de valle y de espín real. El factor 2 extra proviene de tener dos canales difusivos, δQ_0 y $\delta \Pi_0$. Como factor más relevante, la conductividad DC depende inversamente del parámetro de acoplo $g = 4\pi \mu^2 a^{*2} n_{imp}$, que contiene información de la densidad de defectos presente en el sistema.

En conexión con la teoría de los modelos σ no lineales, podemos reescalar los campos δQ_0 como $U = \frac{\sqrt{\hbar}(2\tau)\Gamma_0}{2e} \delta Q_0$, y rescribir (5.55) en función de U en el espacio real como [80, 57]:

$$H_{NL\sigma M} = \sigma_{DC} \int d^2 \mathbf{r} T r \nabla U(\mathbf{r}) \nabla U^{-1}(\mathbf{r}), \quad (5.58)$$

donde ahora σ_{DC} actúa de parámetro de acoplo de la teoría. Este modelo σ eventualmente nos permitiría utilizar toda la maquinaria de grupo de renormalización para calcular correcciones cuánticas a σ_{DC} [81, 57].

Sin necesidad de entrar en el cálculo de dichas correcciones cuánticas, podemos discutir brevemente el resultado obtenido para la conductividad σ_{DC} . El resultado más llamativo, en el contexto de transporte en grafeno desordenado, es que la conductividad, a nivel semiclásico, es inversamente dependiente de la concentración de defectos, una cualidad distintiva, sin embargo, de los sistemas difusivos. Un comportamiento no universal similar se ha encontrado cuando se ha estudiado el efecto sobre el transporte del desorden formado por impurezas cargadas distribuidas aleatoriamente en el sustrato sobre el que se deposita la muestra [82, 83, 84]. Sin embargo, una diferencia crucial entre estos trabajos y el aquí expuesto es que la muestra de grafeno estudiada se encuentra o bien fuertemente dopada o bien existe una densidad de portadores no nula generada por efecto campo inducido por las impurezas cargadas. En nuestro caso, la densidad de estados es generada por el desorden, de igual manera que en las referencias [57, 85].

Otra característica a destacar del modelo presentado aquí es la fuerte dependencia de las propiedades a una partícula, como la vida media $1/\tau$ y la densidad de estados $\rho(0)$, con el parámetro $\hat{\delta}$. La situación aquí es incluso peor que en un gas de electrones bidimensional sometido a un campo magnético aleatorio con correlaciones de largo alcance discutido en la referencia [78]. Allí, aunque el tiempo de vida media de las cuasipartículas es divergente cuando $\hat{\delta} \rightarrow 0$, el tiempo de transporte τ_{tr} es finito. En nuestro caso, τ_{tr} también depende de la densidad de estados al nivel de Fermi, pero ésta diverge para el límite anterior. Como hemos visto, a pesar de esta divergencia, el cálculo semiclásico de la conductividad Drude es independiente de $\hat{\delta}$ y por tanto finito, debido a la particular manera con la que escala la constante de difusión D con la densidad de estados $\rho(0)$.

Hemos definido el parámetro $\hat{\delta}$ de manera fenomenológica como el cociente entre la longitud de correlación λ de los estados en el nivel de Fermi, si estuvieran localizados, y la distancia característica χ . Sin entrar en el cálculo de las correcciones cuánticas a la conductividad, $\hat{\delta}$ es esencialmente no controlable. Podemos, aún así, hacer una estimación del rango de aplicabilidad de nuestro resultado. El régimen difusivo está caracterizado por el recorrido libre medio, definido como $l = v_F \tau_{tr}$, que es mayor que la longitud de localización λ pero más pequeño que el tamaño lineal de la muestra, L . Podemos estimar este recorrido libre medio a partir de τ y $\rho(0)$, y asumiendo que $a^* \sim a$ y $\chi \sim L$. La estimación para el recorrido libre medio es

$$l \sim \frac{2}{3\mu} \left(\frac{\chi}{\lambda} \right)^{1/2} \frac{1}{n_{imp}^{1/2}}. \quad (5.59)$$

Con esta expresión podemos obtener unas cotas superior e inferior a la densidad de

defectos n_{imp} . Empleando $\lambda < l$, obtenemos

$$n_{imp} < \frac{4}{9\mu^2} \frac{L}{\lambda^3}. \quad (5.60)$$

De manera similar, la condición $l < L$ ofrece la cota superior:

$$n_{imp} > \frac{4}{9\mu^2} \frac{1}{L\lambda}. \quad (5.61)$$

5.5 Conclusiones, problemas abiertos y trabajo futuro.

En el presente capítulo hemos abordado la cuestión de cómo se modifica el transporte en grafeno en presencia curvatura inducida por defectos topológicos. Basándonos en el modelo geométrico descrito en los capítulos anteriores, hemos construido un modelo sigma no lineal que describe el comportamiento de los modos colectivos en una muestra de grafeno en presencia de una densidad de defectos topológicos.

Debido a la divergencia del correlador para el desorden, el modelo presenta una fuerte divergencia infrarroja, que “curamos” introduciendo una distancia característica arbitraria que acota la acción de dichos defectos. Debido a esto, todas las propiedades a una partícula dependen de esta distancia arbitraria. Pese a esto, el modelo nos ha permitido determinar un valor para la conductividad a frecuencia cero que es independiente de esta escala de longitudes arbitraria, haciendo que el modelo sea válido cuando se use para estimar cantidades a dos partículas.

Otro detalle interesante es la dependencia del valor de la conductividad con la densidad de desorden. Contrariamente a todos los modelos teóricos no basados en impurezas cargadas, el valor encontrado es en esencia *no perturbativo*, es decir, el valor encontrado no es accesible por medio de teoría de perturbaciones en la densidad de desorden n_{imp} , método que nos daría un valor universal. En nuestro caso, el valor de la conductividad es el esperado en un sistema difusivo, ya que varía con la inversa de la densidad de desorden. En los casos anteriores, la densidad de portadores no nula hace que básicamente el grafeno se comporte como un buen conductor, apareciendo de forma lógica la física de metales desordenados. En nuestro caso, el sistema ha generado una densidad de estados no nula, que si bien depende de la escala arbitraria δ , es capaz de hacer que, a nivel semiclásico, el sistema se comporte como un sistema difusivo.

El valor de la conductividad a frecuencia cero presentado en este capítulo ha sido calculado a nivel semiclásico, lo que hace que no esté justificado compararlo con los datos experimentales. La pregunta siguiente que debemos hacernos es cómo las fluctuaciones cuánticas afectan a este resultado.

En trabajos relacionados con el expuesto aquí[63, 64] se apunta a que el modelo sigma descrito en la ecuación (5.58) debe ir acompañado de un término topológico

(término de Wess-Zumino). La técnica del grupo de renormalización nos permitirá estudiar el flujo de la conductividad con la energía, que, según los trabajos antes citados, puede converger al valor universal. Esta consideración se basa en el análisis de los posibles puntos fijos de la conductividad en función de las simetrías del modelo fermiónico con desorden original. Debido al valor concreto del parámetro de acoplo, la validez de esta suposición es cuestionable. La investigación de la modificación de los puntos fijos en la conductividad se realizará en un futuro.

Capítulo 6

Formación de haces polarizados en el espín de valle en grafeno.

6.1 Introducción.

Como ya se vió en el primer capítulo, la estructura electrónica a baja energía del grafeno viene bien descrita por un modelo de enlace apretado a primeros vecinos para los orbitales híbridos π en el grafeno. Dicho modelo origina dos bandas de energía que se tocan mutuamente en dos puntos no equivalentes (puntos de Dirac). También vimos que estos dos puntos eran el origen de una simetría adicional, que llamamos espín de valle o degeneración de valle. En situación de medio llenado, en la que tenemos un electrón por orbital π , vimos que el nivel de Fermi se encuentra exactamente en dichos puntos. También hemos visto que las excitaciones de baja energía dentro de esta aproximación tienen estructura espinorial y obedecen la ecuación de Dirac sin masa. El origen de esta estructura espinorial en las funciones de onda está en la estructura concreta de la red hexagonal que presenta el grafeno y en la degeneración de valle. El espín real electrónico daría una estructura $SU(2)$ adicional, sin embargo, dicho espín no juega un papel de relevancia en los fenómenos descritos en esta exposición, por lo que ha sido y sigue siendo considerado aquí como una degeneración que únicamente multiplica por dos cualquier resultado que se pueda obtener. Tal y como mencionamos en el primer capítulo, esta descripción en términos de espinores de Dirac solamente es válida a muy bajas energías, del orden de 0.6 a 0.7 eV, dejando de ser lineal por encima de estas energías, según se desprende de medidas de ARPES realizadas en muestras de grafito [18].

En este capítulo vamos a ver un ejemplo sencillo donde este alejamiento de la descripción de Dirac tiene efectos observables. Vamos a considerar uno de los dispositivos más simples que se pueden diseñar, una unión $n - p - n^-$, donde la segunda región n ha sido dopada hasta el punto en el que el nivel de Fermi se sitúa a una energía donde la distorsión trigonal es apreciable. Veremos como este simple hecho hace que,

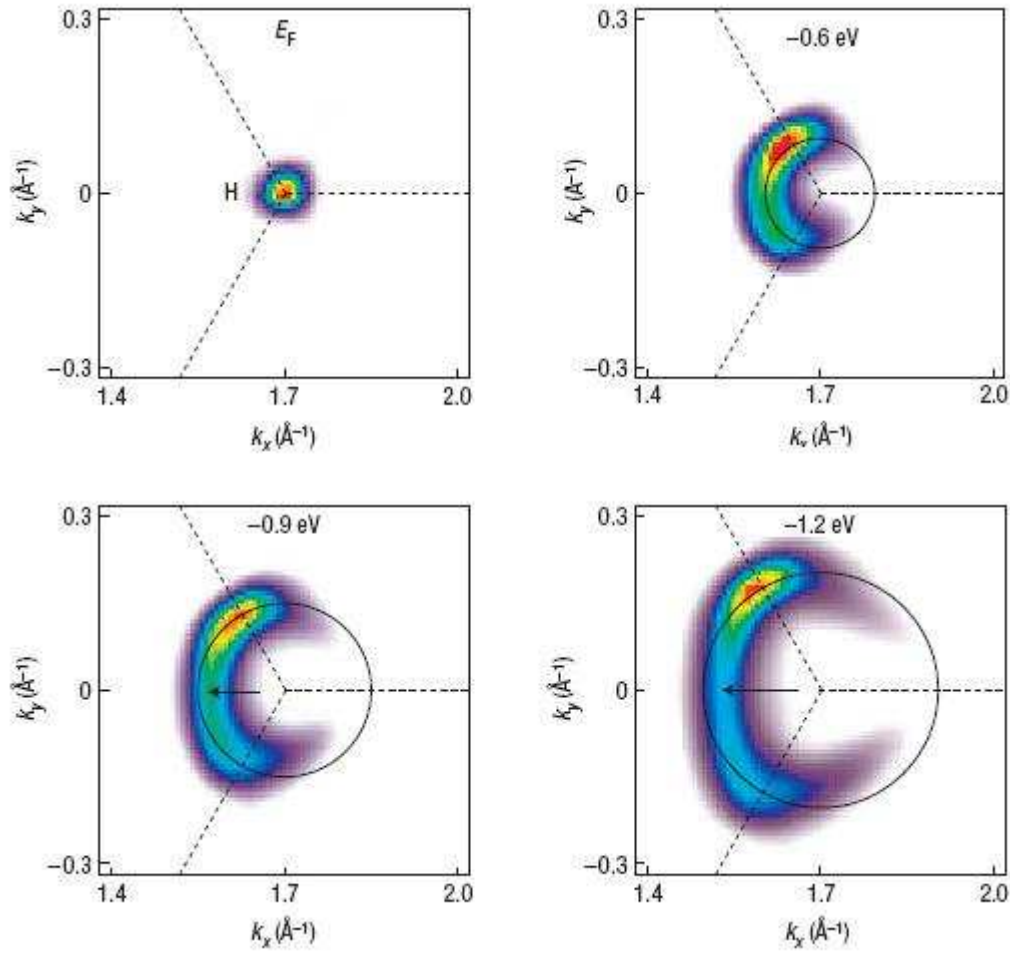


Figura 6.1: Superficies de energ3a constante en torno a los puntos H en grafito. La isotrop3a cesa al alcanzarse energ3as en torno a 0.6 eV . Figura extra3da de la referencia [18].

bajo unas condiciones concretas, se formen dos haces electr3nicos polarizados en el grado de libertad de valle.

Las uniones $p - n$ son los sistemas m3s sencillos que se pueden plantear cuando se pretende estudiar propiedades de transporte en sistemas cu3nticos. En el caso del grafeno, resultan ser muy 3tiles, ya que la transmisi3n electr3nica a trav3s de barreras de potencial presenta diferencias sustanciales frente a sistemas descritos por el hamiltoniano usual en los gases de electrones bidimensionales. La diferencia m3s relevante es la *paradoja de Klein* [86].

Dicho efecto consiste en una transmisi3n anormalmente alta de electrones a trav3s de una barrera de potencial. La transmisi3n resulta ser uno independientemente de la anchura de la barrera, cuando la masa del electr3n incidente es despreciable o nula,

como ocurre en el grafeno [11]. Sin entrar en el detalle matemático, este efecto es fácilmente entendible, si recordamos que los estados electrónicos a baja energía vienen descritos por funciones de onda con helicidad bien definida que debe conservarse en el proceso, ya que la barrera no conecta estados de distinta helicidad. Concretamente, para un estado incidente de momento \mathbf{k}_\perp^i perpendicular a la barrera de potencial, el estado reflejado será ortogonal a dicho estado incidente, y el coeficiente de reflexión idénticamente nulo. Por lo tanto, la transmisión ha de ser uno, lo que significa que el electrón accederá a un estado *propagante* dentro de la barrera. Esto es exactamente lo que ocurre, puesto que dentro de la barrera el electrón encontrará accesibles los estados de la banda de valencia, y concretamente, el estado de momento $-\mathbf{k}_\perp^t$, el cual es inmediato comprobar que dará una transmisión perfecta, de nuevo por mera conservación de la helicidad.

Esta breve discusión sirve para poner de manifiesto que, en el caso del grafeno, como ya hemos mencionado antes, es posible encontrar comportamientos en la transmisión de electrones en el grafeno que no son esperables a primera vista en un semiconductor usual. En la siguiente sección vamos a introducir en detalle el concepto de distorsión trigonal y veremos cómo afecta a la transmisión de electrones, formando, con una propuesta de diseño de unión $n-p-n^+$, un sistema de dos haces electrónicos divergentes polarizados en el valle, así como su relación con el concepto recientemente acuñado de “valletrónica”. A continuación veremos que ésta no es una propiedad exclusiva del grafeno, y cómo los cristales fotónicos, de nuevo bajo ciertas condiciones, pueden mostrar el mismo comportamiento.

6.2 Distorsión trigonal, dispositivos y “valletrónica”.

En esta sección introduciremos el concepto de *distorsión trigonal* (TW, de sus siglas en inglés), mostraremos el cambio cualitativo que la TW produce en la transmisión de electrones por una barrera de potencial, dando algunos números, pensando en la posible realización experimental, y acabaremos explicando por qué este efecto puede ser relevante, situándolo en el contexto de la “valletrónica”.

Escribamos, de nuevo, el hamiltoniano en aproximación de enlace apretado para los electrones π en el grafeno, incluyendo ambos valles:

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \phi_K(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ \phi_K^*(\mathbf{k}) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \phi_{K'}(\mathbf{k}) \\ 0 & 0 & \phi_{K'}^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.1)$$

siendo $\phi(\mathbf{k}) = -t \left(e^{ik_x a} + e^{-\frac{i}{2}k_x} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y a\right) \right)$. En esta ocasión, vamos a desarrollar en torno a momentos pequeños ϕ en torno a ambos puntos de Dirac, y vamos a retener los dos primeros términos:

$$H(\mathbf{k}) \simeq v_F \begin{pmatrix} 0 & k_x - ik_y & 0 & 0 \\ k_x + ik_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -k_x + ik_y & 0 \\ 0 & 0 & -k_x - ik_y & 0 \end{pmatrix} - \frac{v_F a}{4} \begin{pmatrix} 0 & (k_x + ik_y)^2 & 0 & 0 \\ (k_x - ik_y)^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (k_x - ik_y)^2 \\ 0 & 0 & (k_x + ik_y)^2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.2)$$

El primer término es el ya familiar término de Dirac, y el segundo es el término de TW.

la relación de dispersión que se obtiene diagonalizando (6.2) es:

$$E_s(\mathbf{k}) = \pm v_F \sqrt{k^2 + \frac{a^2}{16} k^4 - s \frac{a}{2} (k_x^3 - 3k_x k_y^2)}, \quad (6.3)$$

en donde hemos definido el parámetro $s = \pm 1$ como el índice de valle o espín de valle.

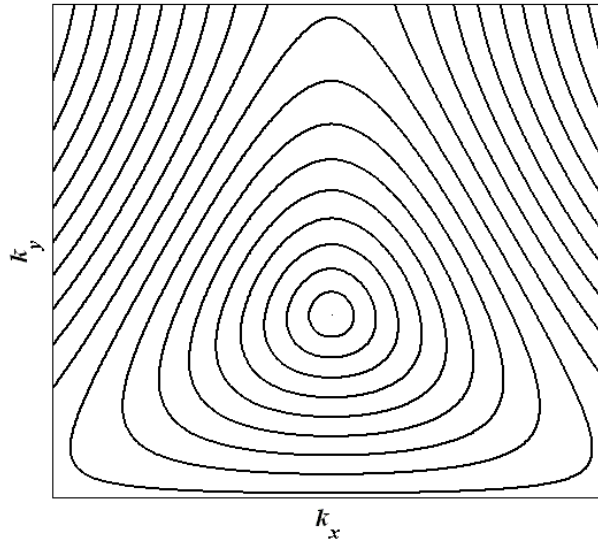


Figura 6.2: Líneas de contorno de la relación de dispersión (6.3) en torno al punto de Dirac K. Las líneas de contorno en torno al otro punto de Dirac, K', se obtienen haciendo una reflexión especular sobre el eje k_x .

Como se puede ver en la figura (6.2), el efecto que produce la inclusión de términos superiores en el hamiltoniano es el de romper la isotropía en el espacio de momentos que presenta el término de Dirac alrededor de cada punto de Dirac, aunque estemos

por debajo de la singularidad de Van Hove, y por tanto, la identidad de cada cono se mantenga.

Pasemos ahora a analizar brevemente nuestra unión $n-p-n^-$. En la figura (6.3), puede verse una imagen real y un esquema de un dispositivo de estas características. Consiste en una pequeña muestra de grafeno depositado sobre un sustrato, generalmente una capa de dióxido de silicio, crecido a partir de silicio dopado, y sobre la cual se deposita por litografía un conjunto de electrodos.

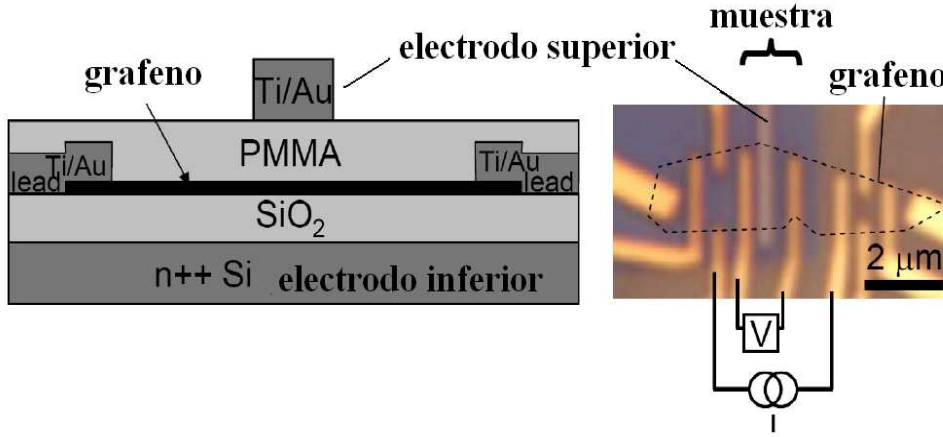


Figura 6.3: Esquema e imagen experimental de un dispositivo electrónico típico de grafeno. El electrodo inferior está formado por silicio dopado, sobre el que se ha hecho crecer una capa de dióxido de silicio. Sobre el SiO_2 se encuentra la lámina de grafeno, y por último, se han depositado el conjunto de electrodos superiores[87].

Los dispositivos como el de la figura (6.3) se basan en el efecto *campo*. Por medio de una diferencia de potencial, llamado voltaje de puerta V_g , entre los electrodos superiores y el electrodo de silicio dopado, es posible controlar la posición del nivel de Fermi en toda la muestra de grafeno. La modificación del nivel de Fermi puede hacerse también localmente, permitiendo crear distintas barreras de potencial, tal y como mostramos esquemáticamente en la figura (6.4). Por último, aplicando un voltaje de polarización V_b en los extremos de la muestra, podemos estudiar la transmisión de electrones a través de cualquier perfil de potenciales que de diseño. El valor esperado de la corriente que circula por la unión viene expresado en función de la velocidad de grupo \mathbf{v}_g y del coeficiente de transmisión t , por medio de la expresión

$$\langle \mathbf{J} \rangle = \frac{e}{\hbar} |t|^2 \mathbf{v}_g. \quad (6.4)$$

El cálculo del coeficiente de transmisión es básicamente un ejercicio de libro de texto: conocidas las funciones de onda en cada una de las regiones de la barrera, los coefi-

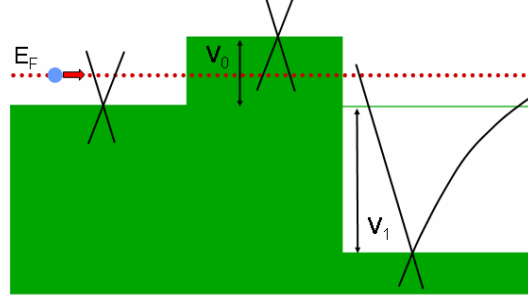


Figura 6.4: Perfil de potenciales en la unión $n - p - n^-$ considerada en el texto.

cientes de transmisión y de reflexión se calculan aplicando la condición de continuidad de las funciones de onda en cada frontera de la barrera. Un detalle a destacar es que no se requiere una condición de contorno para la derivada de la función de onda, puesto que la corriente, como ya sabemos, es un bilineal en la función de ondas, y no depende de su derivada, al contrario de lo que ocurre en el caso de tener un hamiltoniano cuadrático. En el caso de $V_1 = 0$, definido en la figura (6.4), los coeficientes de transmisión y de reflexión han sido calculados en [11] y en [88], en aproximación de barrera abrupta y suave, respectivamente. Tomar una u otra aproximación, aunque modifica cuantitativamente el perfil de los coeficientes de transmisión y de reflexión, no modifica sus rasgos característicos cualitativos, como el mencionado al final de la introducción del presente capítulo, por lo que adoptaremos aquí la aproximación de barrera abrupta, por ser la más sencilla de las dos.

Sin prestar demasiada atención al coeficiente de transmisión, que no nos va a aportar ningún fenómeno nuevo al considerar el término de TW en el hamiltoniano (ver apéndices), el comportamiento de la corriente que pasa a través de la barrera está controlado por la velocidad de grupo:

$$\mathbf{v}_{g,s} \equiv \nabla_{\mathbf{k}} E_s(\mathbf{k}). \quad (6.5)$$

El hecho de que el movimiento del electrón no venga determinado precisamente por la dirección del momento adquiere relevancia cuando las condiciones de contorno sobre las funciones de onda se traducen a condiciones entre los momentos en las diferentes zonas de la barrera. Veamos esto con un poco más de detalle, teniendo en cuenta solamente el término de Dirac en todas las zonas de una unión $n - p$, incluyendo a continuación el término de TW.

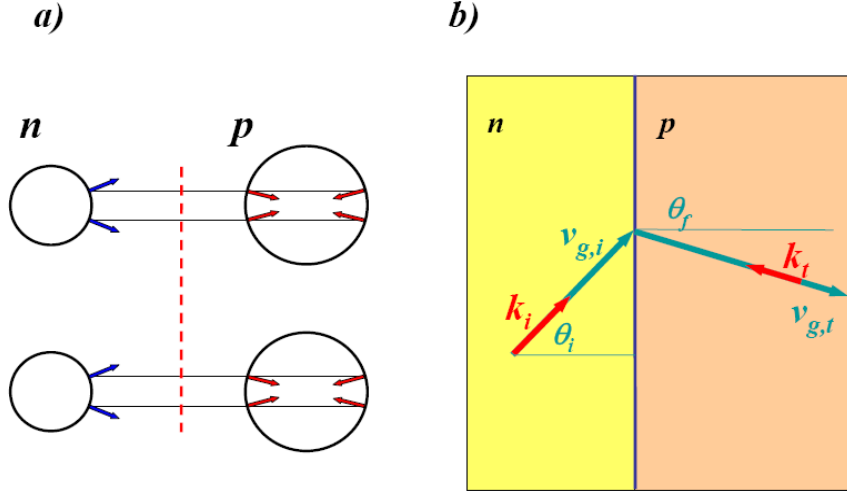


Figura 6.5: (a) Conservación de la componente paralela del momento. Las dos posibles opciones para el momento transmitido. (b) Cinemática de la transmisión.

Tal y como se muestra esquemáticamente en la figura (6.5), un electrón en la banda de conducción con energía E_i , momento $\mathbf{k}_i = |E_i| (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$, y velocidad de grupo $\mathbf{v}_{g,i} = v_F (\cos \theta_i, \sin \theta_i)$ entra en la barrera a un estado de la banda de valencia con energía $E_t = E_i - V_0 = -v_F |\mathbf{k}_t|$. Por conservación de la componente paralela del momento a la barrera, los posibles valores del ángulo de transmisión son θ_t y $\theta'_t = \pi - \theta_t$, con $\cos \theta_t = \cos \theta'_t$ pero $\sin \theta'_t = -\sin \theta_t$ (figura 6.5,a). Necesariamente la velocidad de grupo del electrón transmitido tiene que apuntar hacia el interior de la barrera, lo que fuerza a θ_t a pertenecer al segundo cuadrante, y $|E_i| \sin \theta_i = -|E_t| \sin \theta_f$. Notese que esta derivación es independiente del valle (6.5.a).

Esta *ley de Snell* es similar a la que se encuentra en metamateriales *zurdos*, donde el índice de refracción es negativo (aquí, el papel de índices de refracción lo hacen las energías: $n_t/n_i = |E_t|/|E_i|$). Más adelante volveremos sobre esta semejanza con los materiales *zurdos*.

Cuando se incluye el término de TW, lo primero que hay que tener en cuenta es la orientación relativa entre la red hexagonal y la barrera. Ahora que la relación de dispersión no es isótropa, el resultado de la conservación de la componente paralela de \mathbf{k} dará resultados distintos, tal y como se aprecia en la figura (6.6).

Vamos a considerar la situación en la que $|E_i| \ll |E_t|$. Del capítulo uno, sabemos que la primera zona de Brillouin puede tomarse con forma de un hexágono, en cuyos vértices se encuentran los puntos de Dirac. Esta zona de Brillouin formará una red hexagonal en el espacio de momentos, que se encuentra rotada un ángulo de valor $\frac{\pi}{2}$ con respecto de la red hexagonal en el espacio real. Si nos encontramos en

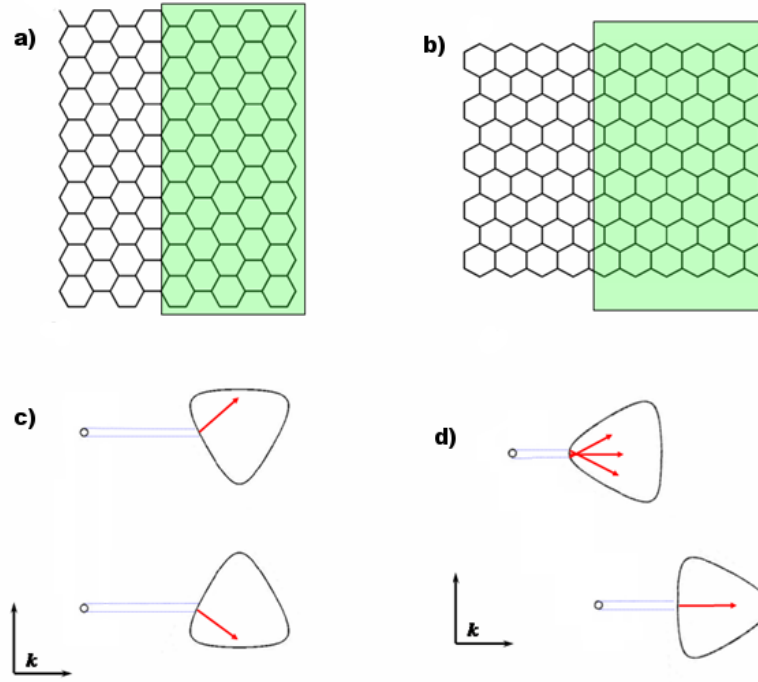


Figura 6.6: Resultado de la conservación del \mathbf{k} paralelo cuando el término de TW es considerado. (a)y (b): Las dos posibles orientaciones límite entre la red y la barrera. (c) y (d): orientaciones entre las superficies de Fermi a un lado y al otro de la barrera de potencial en dichos casos.

la situación descrita en la figura (6.6.a), se aprecia que para cualquier valor de \mathbf{k}_i permitido, dentro de un mismo valle, la velocidad de grupo correspondiente tendrá *muy aproximadamente* la misma velocidad de grupo $\mathbf{v}_{g,t}$, y diferirá en dirección con respecto a la velocidad de grupo del otro valle, produciéndose de manera efectiva una separación de haces polarizados en el índice de valle.

En el otro caso extremo, (figura(6.6.b)), los momentos permitidos en la zona de la barrera presentan un comportamiento muy diferente. Mientras que uno de los valles origina un haz totalmente colimado hacia delante, al otro valle le corresponde una zona con mayor curvatura, lo que se traduce en un haz mucho más disperso.

Podemos pensar en la siguiente realización experimental: una muestra de grafeno depositada sobre un sustrato de SiO_2 sobre la que se ha crecido un conjunto de electrodos que simulan el perfil de potenciales de la figura (6.4). Los electrones son introducidos en el dispositivo a través de una punta de STM, y se transmiten por la muestra bajo una diferencia de potencial de polarización, V_b . En la figura (6.2) se muestran los trazados de rayos correspondientes a las posibles situaciones experimentales para ambos casos extremos, cuando las energías son $E_i = 0.05\text{eV}$ y

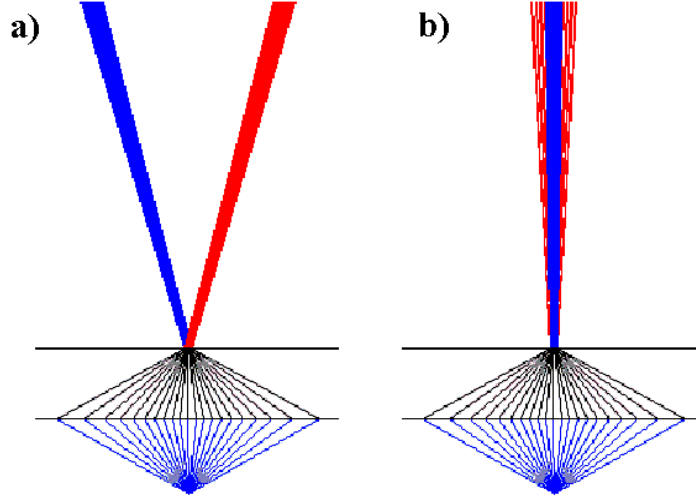


Figura 6.7: (a): Trazado de rayos correspondiente a las figuras (6.6.a y c)

. (b): El mismo trazado, correspondiente a la situación de las figuras (6.6.c y d). En ambas situaciones se ha elegido $|E_t| / |E_i| = 35$.

$E_t = 1.75eV$. La distancia entre la punta y la barrera de potencial es tal que el foco imagen está ligeramente fuera de la barrera.

Es necesario, con vistas a la posible realización experimental, hacer unas estimaciones numéricas. Como hemos mencionado antes, el término de TW comienza a ser relevante a energías del orden de $0.6 - 0.7eV$. Sin embargo, las energías típicas alcanzadas experimentalmente en medidas de efecto campo son en torno a $0.31eV$ [89], energías a las cuales el término de Dirac predomina. Sin embargo, es posible alcanzar valores más altos para el potencial químico modificando algunos parámetros en el dispositivo experimental.

Normalmente, las muestras de grafeno se depositan en sustratos de SiO_2 de unos $300nm$ de espesor. Este valor para el espesor del sustrato no es casual. La manera experimental más eficiente hasta la fecha con la que se identifican las muestras de grafeno es por contraste óptico[3], es decir, por observación directa a través de un microscopio óptico. Para ser identificada, la muestra de grafeno debe tener suficiente contraste con el sustrato desnudo. Este contraste, depende esencialmente del espesor del sustrato y de la longitud de onda de la radiación electromagnética que se esté utilizando, que cae en el rango del visible (entre los $400nm$ y los $700nm$). Esta cota en el rango de longitudes de onda hace que el contraste, definido como la variación relativa de intensidad luminosa medida en el sustrato con y sin muestra de grafeno, sea máximo a espesores de unos $300nm$. Sin embargo, teóricamente[3] se ha encontrado que existe otro máximo de contraste a un espesor de sustrato de $90 - 100nm$, que,

junto con un valor típico de voltaje de puerta de $V_g \sim 100V$, permiten alcanzar unos valores para el potencial químico de $\sim 0.6eV$, mucho más cerca del valor que necesitamos para empezar a notar el término de TW.

El efecto de separación de haces polarizados en grafeno que hemos descrito antes tiene más importancia de la que aparenta. Recordemos una vez más que el grado de libertad de valle corresponde a una simetría $SU(2)$ extra, inicialmente presente en todos los sistemas con fermiones de Dirac no interactuantes en una red ([90, 91]). Hasta hace poco, esta simetría jugaba un papel secundario en las propiedades de transporte en grafeno, exceptuando quizá el problema de la ausencia de localización débil, donde transiciones entre valles debidas a ciertos tipos de desorden([69]) pueden originar una ruptura efectiva de la simetría bajo inversión temporal, y la ausencia de magnetoresistencia a campos magnéticos pequeños, señal de localización (o antilocalización) débil en sistemas electrónicos([92]).

El espín de valle adquiere protagonismo a partir del trabajo de A. Rycerz, J. Tworzydło y C. W.J. Beenakker[1], donde proponen usarlo de manera similar al espín real en dispositivos de espintrónica. Esta semejanza pasa por la posibilidad de crear y mantener corrientes polarizadas en el espín de valle y la detección eficiente de dicha polarización. En este trabajo se propone la creación de un filtro de valle a partir de una tira de grafeno donde se ha construido un nanocontacto cuántico, sometido al efecto de un voltaje de puerta local. Debido al tamaño finito W de la lámina de grafeno, los valores para la componente transversa del momento se encuentran cuantizados, con un espaciamiento de niveles $\Delta \propto 1/W$, fuera del nanocontacto, y $\delta_c \propto 1/W_c$ dentro del nanocontacto, con $\Delta_c > \Delta$. Los estados que pueden atravesar el nanocontacto son aquellos que tengan una $v_g = \text{sign}\left(\frac{\partial E(k)}{\partial k}\right)$ definida (según el signo del voltaje de polarización aplicado), y el resto es simplemente contar el número de estados permitidos con una v_g dada dentro y fuera del nanocontacto para ambos valles. El resultado final es una mayor población de uno de los dos valles respecto del otro, y de forma efectiva, la polarización en el espín de valle de la corriente, entendiendo la polarización como el cociente entre estados permitidos dentro del nanocontacto con una v_g dada y estados totales fuera del nanocontacto con dicha v_g . La eficiencia de esta polarización va decayendo a medida que el nivel de Fermi aumenta, pasando por los valores $1, \frac{1}{3}, \frac{1}{5} \dots$

Gracias a este ejemplo, vemos que tener corrientes polarizadas en el espín de valle es de relevancia capital si pretendemos usar dispositivos de grafeno basados en la “valletrónica”. La desventaja principal de la propuesta de Rycerz y colaboradores es experimental: a día de hoy no hay manera ni de obtener tiras de grafeno con bordes bien controlados, ni de fabricar nanocontactos como los requeridos en este esquema. La propuesta presentada en este capítulo para la generación de haces polarizados en espín de valle podría suplir dichas dificultades experimentales, al necesitar únicamente de una barrera de potencial electrostático, barreras que se pueden obtener sin problema hoy día en los laboratorios.

6.3 Analogía óptica.

El fenómeno de haces polarizados en espín no es un fenómeno exclusivo que aparece en el grafeno, si lo consideramos como un fenómeno relacionado con la propagación de ondas en medios materiales, y nos olvidamos por un momento de la naturaleza de dicha onda. Los ingredientes básicos que han dado lugar a la formación de haces son: la propagación de una onda a una energía para la cual el medio en el que se transmite dicha onda es anisótropo, y la curva de isofrecuencia presenta zonas planas para un amplio rango de momentos. Como vamos a ver a continuación, algunos cristales fotónicos van a mostrar el mismo fenómeno de formación de haces, en este caso, de haces luminosos, exactamente por la misma razón física por la cual los presenta el grafeno.

Un cristal fotónico[93] (PC) es una estructura artificial que posee una constante dieléctrica periódica, diseñada para albergar radiación electromagnética de la misma forma que un cristal puede albergar y controlar electrones. De la misma manera que los electrones en los cristales reales, la propagación de la luz en el seno de un cristal fotónico viene gobernada por el teorema de Bloch, y, por lo tanto, solamente unos vectores de onda estarán permitidos para la luz, dando lugar a la formación de bandas en el cristal fotónico[94] (por supuesto, también puede ocurrir que un rango de frecuencias no esté permitido para la propagación de ondas, es decir, pueden aparecer *gaps* en la estructura de bandas.)

De la misma manera que en la propagación de electrones en cristales, la periodicidad en los cristales fotónicos hacen que los vectores de onda formen un espacio finito, la zona de Brillouin. Como ejemplo concreto de analogía óptica con el grafeno consideraremos un cristal fotónico bidimensional de estructura de red triangular. En la figura (6.8) podemos ver la estructura de bandas para dicho cristal fotónico con dos índices de refracción diferentes, $n_1 = 3.4$ para las bandas rojas y $n_2 = 2.65$ para las bandas azules. La zona de Brillouin de este cristal fotónico es, al igual que la del grafeno, hexagonal, pero con la diferencia de estar ambas zonas de Brillouin rotadas una respecto de la otra en el espacio de momentos. Este hecho es debido simplemente a la diferente estructura de red que presentan el grafeno y el cristal fotónico que vamos a considerar aquí.

El segundo detalle que nos va a permitir continuar con la analogía óptica es la estructura de las bandas en torno a los puntos K y K' de la zona de Brillouin. En la figura (6.9) se muestra ampliada dicha zona de la banda. De manera similar al grafeno, dos bandas de cristal fotónico, a una frecuencia dada, se tocan en un único punto, siendo la banda a continuación *lineal*, es decir, la luz, en el entorno de esos puntos K y K' y a unas frecuencias determinadas, se comporta como si fuera libre, pero a una velocidad efectiva dada por $\mathbf{v}_g = \nabla_{\mathbf{k}}\omega(\mathbf{k})$. Por supuesto, a medida que consideremos frecuencias mayores, la aproximación lineal deja de ser válida, apareciendo el efecto de distorsión trigonal.

Ahora que contamos con una estructura de bandas similar, para hacer la analogía

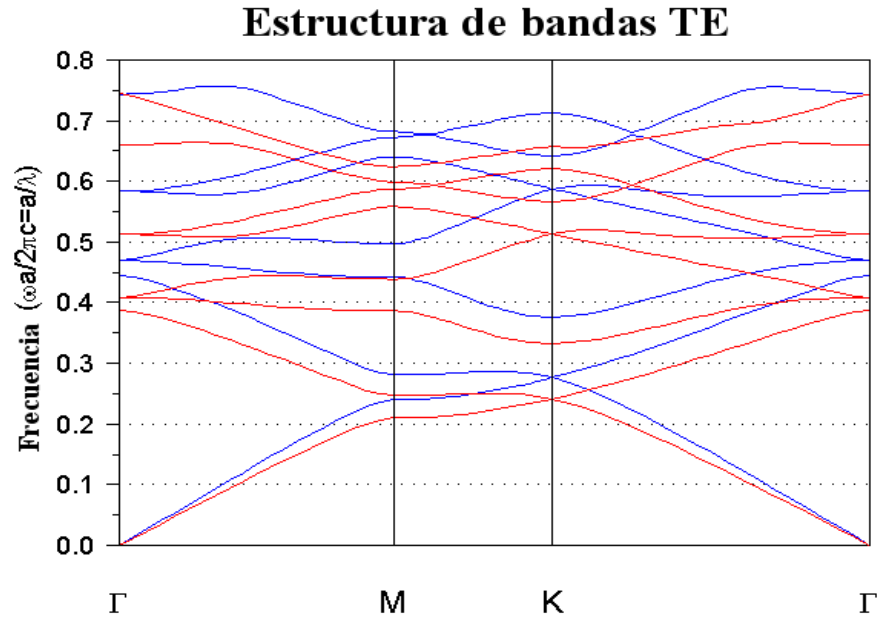


Figura 6.8: Estructura de bandas para dos cristales fotónicos de estructura trigonal con diferentes valores del índice de refracción. $n_1 = 3.4$ para las bandas rojas y $n_2 = 2.65$ para las bandas azules. En la figura se muestra únicamente la estructura de bandas para la zona de Brillouin reducida, formada por los puntos Γ , M y K . En la zona de Brillouin completa aparecerá otro punto K' , de forma similar a lo que ocurre en la zona de Brillouin del grafeno.

entre ambos sistemas completa, necesitamos poder simular con cristales fotónicos una unión $p-n$. A diferencia del caso electrónico, con cristales fotónicos no podemos modificar el llenado de las bandas (esto es, el nivel de Fermi) por medio de un voltaje de puerta externo, ya que solamente podemos trabajar con frecuencias aisladas para la luz. La forma de solucionar este problema es trabajar con una sola frecuencia pero considerar dos cristales fotónicos con estructura de bandas similar, cuyos parámetros característicos (índice de refracción y parámetro de red) sean diferentes. Éste es el motivo por el cual dibujamos en la figura (6.8) dos estructuras de bandas para dos cristales fotónicos de parámetros diferentes. En la figura (6.9) se muestra una imagen en detalle de la estructura de bandas en torno al punto K , donde se observa la estructura de conos. Aunque en la figura (6.8) no se muestra, tenemos el mismo cono en torno al punto K' .

En las figuras (6.10) y (6.11) se muestra una simulación numérica de elementos finitos del módulo del campo eléctrico procedente de una fuente puntual emitiendo luz polarizada en el modo transversal eléctrico con longitud de onda $\lambda = 4.08a_{PC}$ en una matriz dieléctrica con índice de refracción $n_1 = 3.04$ junto con otro cristal fotónico de

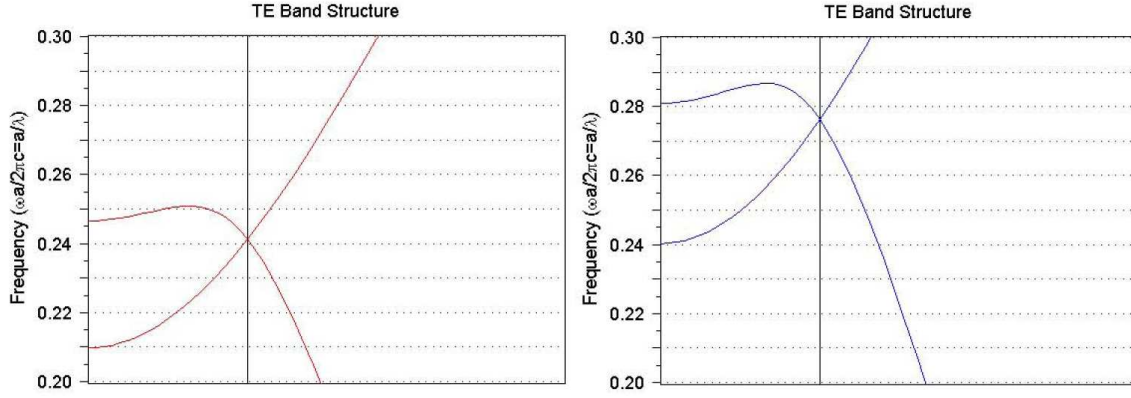


Figura 6.9: Detalle de la estructura de bandas en torno al punto K para los dos cristales fotónicos considerados en el texto. Debido a la diferencia de parámetros entre ambos cristales, el punto en el cual se tocan las bandas estará situado a diferentes energías en ambos casos, por lo que la velocidad de grupo en ambas situaciones a una misma energía será muy diferente, dando lugar a los fenómenos de separación de haces o de colimación.

la misma estructura pero con índice de refracción ligeramente más pequeño $n_2 = 2.65$ en ambos casos.

6.4 Conclusiones.

En el capítulo 6 hemos estudiado una manera alternativa a la propuesta en la referencia [1] para la creación de haces de electrones polarizados en espín. La propuesta presentada consiste en una unión $n - p - n^-$ en la que en uno de sus lados se ha introducido un dopado por medio de efecto campo tal que el nivel de Fermi se encuentra en la zona de energías donde la distorsión trigonal es apreciable. Las superficies de Fermi para cada valle, debido a la distorsión trigonal, son diferentes. Esto hace que las direcciones de las corrientes transmitidas a través de la barrera tengan direcciones distintas para cada valle, produciéndose un efecto de separación de haces electrónicos polarizados en el valle.

El efecto de polarización de valle es muy sensible a la orientación relativa entre la red y la barrera de potencial, encontrándose que solamente se da cuando la barrera es paralela a la ordenación zig-zag en la red, por lo que la separación de haces electrónicos es uno de los dos casos extremos que pueden ocurrir. El otro efecto, asociado a la ordenación “armchair”, consiste en la colimación de uno de los dos haces, mientras que el otro sufre una dispersión angular.

Hemos mostrado que las energías en las que la distorsión trigonal comienza a

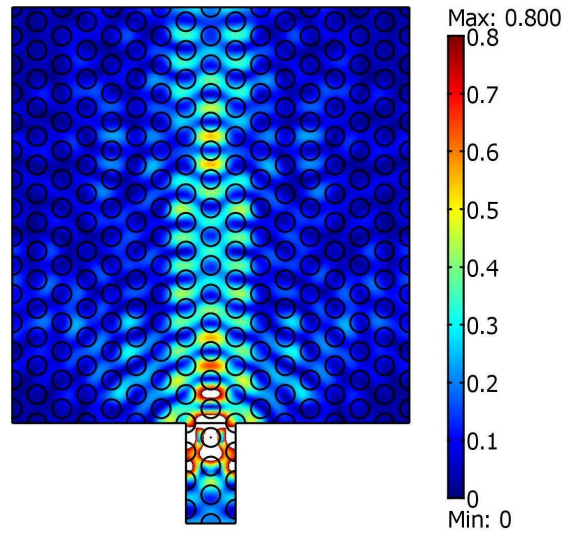


Figura 6.10: Estructura de dos cristales fotónicos que simula una unión $p - n$. La disposición zig-zag de los cilindros produce el efecto de colimación de haces, a diferencia con el caso electrónico, en donde esta configuración de la red produce el efecto de separación de haces.

ser apreciable están en el límite de las posibilidades experimentales actuales. No obstante, variando el espesor del sustrato de SiO_2 , es posible alcanzar valores de dopado correspondientes a las energías de la zona de distorsión trigonal. El valor del espesor de sustrato es clave a la hora de poder identificar experimentalmente las muestras de grafeno por medio de un microscopio óptico, por lo que su variación juega en detrimento de la posible realización experimental del dispositivo propuesto, ya que, como hemos dicho, para tal valor es complicado alcanzar las energías necesarias, mientras que si tal espesor es modificado, aunque sea levemente, se corre el riesgo de no poder observar la muestra de grafeno. Sin embargo, existe otro valor para el cual el contraste óptico de la muestra de grafeno con el sustrato es óptimo[3], valor que permitiría alcanzar dopados suficientes como para ver los efectos aquí descritos sin problema.

Al final del capítulo hemos construido una analogía de la transmisión electrónica en grafeno con la transmisión de luz en cristales fotónicos. En tales sistemas es posible encontrar puntos de Dirac en las bandas, obteniéndose propiedades de transporte análogas a las encontradas en grafeno[95, 96, 97]. Entre esas propiedades se encuentra la separación de haces electromagnéticos procedentes de distintos valles, y la colimación y dispersión angular de haces. La ventaja de la observación de tales fenómenos es la ventaja experimental que conlleva, puesto que estas estructuras son de uso actual en los laboratorios de óptica.

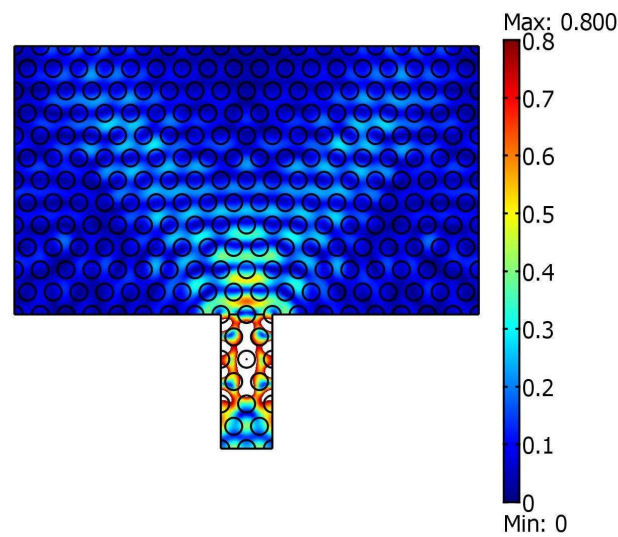


Figura 6.11: Estructura de dos cristales fotónicos que simula una unión $p-n$. La disposición *armchair* de los cilindros produce el efecto de separación de haces, en el caso electrónico, la configuración de este tipo genera el efecto de colimación electrónica.

Apéndice A

Teoría de la respuesta lineal.

A.1 El teorema de fluctuación-disipación.

En general, los experimentos en Física de la Materia Condensada consisten en estudiar la respuesta del sistema bajo la acción de perturbaciones externas. En la gran mayoría de los casos, si la perturbación es pequeña, la respuesta del sistema será lineal, esto es, proporcional a dicha perturbación. Por tanto, el objeto de estudio en esas condiciones es el término de proporcionalidad entre perturbación aplicada y respuesta medida, que recibe el nombre de susceptibilidad generalizada χ . Entre las múltiples aplicaciones que posee la teoría de respuesta lineal, una de las más importantes es la respuesta del sistema a campos electromagnéticos externos, de donde se extraerá información sobre la susceptibilidad de espín o de carga del sistema.

En este apéndice vamos a introducir de manera muy breve la teoría de la respuesta lineal a través de un caso concreto, que sin embargo ha demostrado ser de la mayor importancia en el capítulo 3, consistente en la respuesta del sistema a un campo eléctrico (o una diferencia de potencial) externo.

En general, podemos entender la respuesta $\hat{X}(x)$ del sistema a una perturbación externa $F(x)$ como el valor esperado de cierto operador X :

$$\hat{X}(x) = \langle \bar{\psi}(x) X \psi(x) \rangle. \quad (\text{A.1})$$

En esta ocasión, el promedio funcional se va a realizar empleando la acción $S = S_0 + \delta S[F]$, donde S_0 es la acción del sistema sin perturbar y

$$\delta S[F] = \int dx F(x) \bar{\psi}(x) X \psi(x), \quad (\text{A.2})$$

es el término correspondiente a la perturbación generada por la fuerza generalizada $F(x)$. Al final de los cálculos, haremos $F = 0$ para poder identificar el promedio funcional en (A.1) con el valor esperado en el vacío de la teoría original, descrita únicamente por S_0 :

$$\hat{X}(x) = -\frac{\delta}{\delta F(x)} \log \mathcal{Z}[F]|_{F=0}. \quad (\text{A.3})$$

Vamos a añadir formalmente otro término a la acción total similar en estructura a (A.2) asociado a una segunda fuerza generalizada F' , de tal manera que (A.3) pase a ser ahora

$$\hat{X}(x) \equiv \langle X \rangle = -\frac{\delta}{\delta F(x)} \log \mathcal{Z}[F, F']|_{F=F'=0}. \quad (\text{A.4})$$

La diferencia, aunque formal, asegura que el valor esperado (A.4) sea distinto de cero. El otro motivo por el cual se ha introducido esta segunda fuerza generalizada es que vamos a considerar que X depende débilmente de F' , y es suficiente considerar en (A.4) el término lineal en F' :

$$\hat{X}(x) \simeq -\frac{\delta}{\delta F(x)} \left(\log \mathcal{Z}[F, F']|_{F'=0} + \frac{1}{\mathcal{Z}[F, F']|_{F'=0}} \frac{\delta}{\delta F'} \mathcal{Z}[F]|_{F'=0} F' \right) |_{F=0}. \quad (\text{A.5})$$

La susceptibilidad generalizada χ definida a través de la relación $\hat{X} = \chi F'$ tiene la expresión siguiente, en términos de derivadas funcionales:

$$\chi(x, x') = -\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\delta^2}{\delta F(x) \delta F'(x')} \mathcal{Z}[\mathcal{F}, \mathcal{F}']|_{F=F'=0} + \left(\frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\delta \mathcal{Z}}{\delta F}|_{F=F'=0} \right)^2. \quad (\text{A.6})$$

Aplicando las derivadas funcionales a \mathcal{Z} y usando (A.4) la expresión de χ función del operador \hat{X} es

$$\chi(x, x') = \langle \hat{X}(x) \hat{X}(x') \rangle - \langle \hat{X}(x) \rangle \langle \hat{X}(x') \rangle = \langle (\hat{X}(x) - \langle \hat{X}(x) \rangle) (\hat{X}(x') - \langle \hat{X}(x') \rangle) \rangle. \quad (\text{A.7})$$

La relación entre $X(x)$ y la fuerza generalizada $F(x')$ puede escribirse entonces como

$$\langle X(x) \rangle \simeq \int dx' \chi(x, x') F(x'). \quad (\text{A.8})$$

El caso de respuesta lineal a un campo electromagnético electromagnético aplicado $A_\mu(x)$ que actuará como fuerza externa $F(x)$, el sistema responderá originando una redistribución espaciotemporal de la carga $\rho(x) = \langle \hat{\rho}(x) \rangle$ y (o) una corriente neta $\mathbf{j}(x) = \langle \hat{\mathbf{j}}(x) \rangle$. Usando una notación generalizada $j_\mu = (\rho, \mathbf{j})$ podemos escribir (A.8) en este caso particular como:

$$j_\mu(x) = \int dx' K_{\mu\nu}(x, x') A^\nu(x'). \quad (\text{A.9})$$

La invariancia gauge introduce una ligadura en la susceptibilidad $K_{\mu\nu}(x, x')$:

$$\partial_x^\mu K_{\mu\nu}(x, x') = 0.$$

Por supuesto, a partir de la definición general (A.6) podemos escribir ($A_\mu = A'_\nu$)

$$K_{\mu\nu}(x, x') = -\mathcal{Z}^{-1} \frac{\delta^2}{\delta A_\mu(x) \delta A_\nu(x')} \mathcal{Z}[A]|_{A=0} + \langle j_\mu \rangle^2, \quad (\text{A.10})$$

y, por tanto, $K_{\mu\nu}(x, x') = K_{\nu\mu}(x, x')$, es decir, $K_{\mu\nu}(x, x')$ es simétrico.

En la teoría de la electrodinámica en medios materiales, la relación (A.9) es ya conocida. Si la escribimos en el espacio de momentos, la ecuación integral pasa a ser la siguiente ecuación algebraica:

$$j_\mu(\omega, \mathbf{q}) = K_{\mu\nu}(\omega, \mathbf{q}) A_\nu(\omega, \mathbf{q}). \quad (\text{A.11})$$

Es natural considerar la situación en la que las fluctuaciones medidas sean de tamaño macroscópico, comparable al tamaño macroscópico. Además, experimentalmente es usual emplear campos eléctricos y magnéticos cuyas variaciones espaciales sean muy pequeñas comparadas con el tamaño típico de las muestras. Esto hace que sea lógico tomar el límite $q \rightarrow 0$ en (A.11). Empleando la condición de gauge $\nabla\phi = 0$ junto con $\mathbf{E}(\omega) = \omega\mathbf{A}$ y podemos reescribir la parte espacial de j_μ como

$$\mathbf{j}(\omega) = \sigma(\omega)\mathbf{E}(\omega), \quad (\text{A.12})$$

que es la ley de Ohm en su forma vectorial. De esta forma, queda definido el tensor conductividad eléctrica a partir de la susceptibilidad $K_{\mu\nu}$:

$$\sigma(\omega) = \lim_{\mathbf{q} \rightarrow 0} \frac{1}{\omega} K_{ij}(\omega, \mathbf{q}). \quad (\text{A.13})$$

A.2 La relación de Einstein.

La relación de Einstein nos va a permitir calcular la conductividad a frecuencia o voltaje cero en una aproximación semiclásica a partir de la densidad de estados del sistema en cuestión y la constante de difusión sin necesidad de aplicar la expresión (A.13) directamente.

Si consideramos en general un gas de electrones sometido a un potencial eléctrico $\phi(\mathbf{r})$ a temperatura constante, una variación local de dicho potencial eléctrico originará una variación en la densidad de electrones n según la expresión (en equilibrio, el potencial químico cumple $\mu(\mathbf{r}) = e\phi(\mathbf{r})$)

$$\delta n(\mathbf{r}) = \left. \frac{dn}{d\mu} \right|_{\mu=E_F} e\delta\phi(\mathbf{r}). \quad (\text{A.14})$$

Por otra parte, una variación espacial de la densidad de electrones produce un movimiento en forma de corriente de difusión, que, en situación de equilibrio, tratará de contrarrestar dicha variación $\delta P(\mathbf{r})$:

$$\mathbf{j} = -eD\nabla n(\mathbf{r}) = -De^2 \left. \frac{dn}{d\mu} \right|_{\mu=E_F} \nabla\phi(\mathbf{r}). \quad (\text{A.15})$$

Igualando esta expresión para la corriente con (A.12) y empleando $\mathbf{E}(\mathbf{r}) = -\nabla\phi(\mathbf{r})$ llegamos inmediatamente a

$$\sigma = e^2 \left. \frac{dn}{d\mu} \right|_{E=E_F} D. \quad (\text{A.16})$$

Es bien conocido que la densidad de electrones se puede obtener a partir de la densidad de estados sabiendo que

$$n = \frac{1}{\hbar} \int^{\mu} \rho(E) dE. \quad (\text{A.17})$$

Simplemente derivando esta expresión con respecto a μ y particularizando en el nivel de Fermi, obtenemos la versión final de la relación de Einstein:

$$\sigma = \frac{e^2}{\hbar} \rho(E_F) D. \quad (\text{A.18})$$

Bibliografía

- [1] A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker. Valley filter and valley valve in graphene. *Nat. Phys.*, 3:172, 2007.
- [2] A. K. Geim and K. S. Novoselov. The rise of graphene. *Nature*, 6:183, 2007.
- [3] P. Blake, K. S. Novoselov, A. H. Castro Neto, D. Jiang, R. Yang, T. J. Booth, A. K. Geim, and E. W. Hill. Making graphene visible. *Appl. Phys. Lett.*, 91:063124, 2007.
- [4] K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, and A. K. Geim. Two-dimensional atomic crystals. *Proc. Natl. Acad. sci. USA*, 102:10451–10453, 2005.
- [5] A. Fasolino, J. H. Los, and M. I. Katsnelson. Intrinsic ripples in graphene. *Nat. Materials*, 2007.
- [6] Q. Zheng, B. Jiang, S. Liu, J. Zhu, Q. Jiang, Y. Weng, L. Lu, S. Wang, Q. Xue, and L. Peng. Self-retracting motion of graphene microflakes. *arXiv:0709.4068*.
- [7] G. V. Semenoff. Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly. *Phys. Rev. Lett.*, 53:2449, 1984.
- [8] F. D. M. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, 61:2015, 1988.
- [9] J. González, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano. The electronic spectrum of fullerenes from the dirac equation. *Nucl. Phys. B*, 406 [FS]:771, 1993.
- [10] D. T. Son. Quantum critical point in graphene approached in the limit of infinitely strong coulomb interaction. *Phys. Rev. B*, 75:235423, 2007.
- [11] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim. Chiral tunneling and the klein paradox in graphene. *Nature Phys.*, 2:620, 2006.

- [12] A. C. Ferrari, J. C. Meyer, V. Scardaci, C. Casiraghi, M. Lazzeri, F. Mauri, S. Piscanec, D. Jiang, K. S. Novoselov, S. Roth, and A. K. Geim. Raman spectrum of graphene and graphene layers. *Phys. Rev. Lett.*, 97:187401, 2006.
- [13] A. H. Castro Neto and F. Guinea. Electron-phonon coupling and raman spectroscopy in graphene. *Phys. Rev. B*, 75:045404, 2007.
- [14] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov. Unconventional integer quantum hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95:146801, 2005.
- [15] I. Herbut. Theory of integer quantum hall effect in graphene. *Phys. Rev. B*, 75:165411, 2007.
- [16] E. MacCann and V. L. Falko. Landau-level degeneracy and quantum hall effect in a graphite bilayer. *Phys. Rev. Lett.*, 96:086805, 2006.
- [17] P. R. Wallace. The band theory of graphite. *Phys. Rev.*, 71:622, 1947.
- [18] S.Y. Zhou, G.-H. Gweon, J. Graf, A.V. Fedorov, C.D. Spataru, R.D. Diehl, Y. Kopelevich, D.-H. Lee, Steven G. Louie, and A. Lanzara. First direct observation of dirac fermions in graphite. *Nature Physics*, 2:595, 2006.
- [19] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid state physics*. Brooks Cole, 1976.
- [20] A. A. Abrikosov, L. P. Gorkov, and I. E. Dzyaloshinski. *Methods of quantum field theory in statistical physics*. Dover, 1975.
- [21] D. R. Nelson and L. Peliti. Fluctuations in membranes with crystalline and hexatic order. *J. Physique*, 48:1987, 1987.
- [22] Y. Kantor and D. R. Nelson. Crumpling transition in polymerized membranes. *Phys. Rev. Lett.*, 58:2774, 1987.
- [23] Y. Kantor and D. R. Nelson. Phase transitions in flexible polymeric surfaces. *Phys. Rev. A*, 36:4020, 1987.
- [24] P. G. de Gennes and C. TAupin. *J. Phys. Chem. B*, 86:2294, 1982.
- [25] M. O. Katanaev and I. V. Volovich. Theory of defects in solids and three-dimensional gravity. *Annals of Physics*, 216:1, 1992.
- [26] J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two dimensional systems. *J. Phys. C: Solid State Phys.*, 6:1181, 1973.
- [27] J-M Park and T. C. Lubensky. Topological defects on fluctuating surfaces: General properties and the kosterlitz-thouless transition. *Phys. Rev. E*, 53:2648, 1996.

- [28] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Theory of elasticity*. Pergamon, New York, 1970.
- [29] Q. Wang. Effective in-plane stiffness and bending rigidity of armchair and zigzag carbon nanotubes. *Int. J. Solids. Struc.*, 41:5451, 2004.
- [30] P. E. Lammert and V. H. Crespi. Topological phases in graphitic cones. *Phys. Rev. Lett.*, 85:5190, 2000.
- [31] P. E. Lammert and V. H. Crespi. Graphene cones: Classification by fictitious flux and electronic properties. *Phys. Rev. B.*, 69:035406, 2004.
- [32] J. González, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano. Continuum approximation to fullerene molecules. *Phys. Rev. Lett.*, 69:172, 1992.
- [33] V. A. Osipov and E. A. Kochetov. Topological phases in graphitic cones. *Pis'ma v ZhETF*, 73:631, 2001. English translation: JETP Lett, **73**, 562 (2001).
- [34] A. J. Stone and D. J. Wales. Theoretical studies of icosahedral c_{60} and some related specie. *Chem. Phys. Lett.*, 128, 1986.
- [35] Y. Miyamoto, A. Rubio, S. Berber, M. Yoon, and D. Tománek. Spectroscopic characterization of stone-wales defects in nanotubes. *Phys. Rev. B*, 69, 2004.
- [36] E. J. Duplock, Matthias Scheffler, and Philip J. D. Lindan. Hallmark of perfect graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 92, 2004.
- [37] A. Cortijo and M. A. H. Vozmediano. Electronic properties of curved graphene sheets. *Eur. Phys. Lett.*, 77:47002, 2007.
- [38] A. Cortijo and M. A. H. Vozmediano. Effects of topological defects and local curvature on the electronic properties of planar graphene. *Nucl. Phys. B*, 763:293, 2007.
- [39] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, T. J. Booth, and S. Roth. The structure of suspended graphene sheets. *Nature*, 446:60, 2007.
- [40] M. Ishigami, J. H. Chen, W. G. Cullen, M. S. Fuhrer, and E. D. Williams. Atomic structure of graphene on sio₂. *Nano Letters*, 2007.
- [41] Steven Weinberg. *Gravitation and cosmology: Principles and applications of the general theory of relativity*. Wiley, 1972.
- [42] A. Vilenkin and E. P. S. Shellard. *Cosmic Strings and Other Topological Defects*. Cambridge University Press, 2000.

- [43] A. N. Aliev, M. HÖrtacsu, and N. Ozdemir. Vacuum fluctuations of a massless spin- $1/2$ field around multiple cosmic strings. *Class. Quantum. Grav.*, 14, 1997.
- [44] B. A. Dubrovin, A. T. Fomenko, and S. P. NÓvikov. *Métodos y aplicaciones de Geometría moderna 1*. Ed. URSS, 2000.
- [45] Henrik Bruus and Karsten Flensberg. *Many-body Quantum Theory in Condensed Matter Physics*. Oxford University Press, 2005.
- [46] R. Tamamura and M. Tsukada. Disclinations of monolayer graphite and their electronic states. *Phys. Rev. B*, 49:7697, 1994.
- [47] J. C. Meyer, A. K. Geim, M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, D. Obergfell, S. Roth, C. Girit, and A. Zettl. On the roughness of single- and bi-layer graphene membranes. *Solid State Commun.*, 143:101, 2007.
- [48] E. Stolyarova et al. High-resolution scanning tunneling microscopy imaging of mesoscopic graphene sheets on an insulating surface. *cond-mat/0705.0833*.
- [49] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, L. A. Ponomarenko, D. Jiang, and A. K. Geim. Strong suppression of weak localization in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 97:016801, 2006.
- [50] I. S. Gradshteyn and I. M. Ryzhik. *Tables of integrals, series and products*. Academic Press, New York, 1980.
- [51] A. Castro-Neto and E. Kim. Charge inhomogeneity and the structure of graphene sheets. 2007.
- [52] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, 438:197, 2005.
- [53] Y. Zhang, Y.-W. Tan, H. L. Stormer, and P. Kim. Experimental observation of the quantum hall effect and berry’s phase in graphene. *Nature*, 438:201, 2005.
- [54] K. Nomura and A. H. MacDonald. Quantum transport of massless dirac fermions. *Phys. Rev. Lett.*, 98:076602, 2007.
- [55] F. Miao, S. Wijeratne, U. Coskun, Y. Zhang, and C.N. Lau. Phase coherent transport of charges in graphene quantum billiard. *arXiv:cond-mat/0609215*.
- [56] Sub-poissonian shot noise in graphene.
- [57] E. Fradkin. Critical-behavior of disordered degenerate semiconductors. ii. spectrum and transport-properties in mean-field theory. *Phys. Rev. B*, 33:3263, 1986.

-
- [58] D. V. Khveshchenko. Coulomb interacting dirac fermions in disordered graphene. *Phys. Rev. B.*, 74:161402(R), 2006.
- [59] P. A. Lee. Localized states in a d-wave superconductor. *Phys. Rev. Lett.*, 71:1887, 1993.
- [60] A. W. W. Ludwig, M. P. A. Fisher, R. Shankar, and G. Grinstein. Integer quantum hall transition - an alternative approach and exact results. *Phys. Rev. B*, 50:7526, 1994.
- [61] K. Ziegler. Robust transport properties in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 97:266802, 2006.
- [62] K. Ziegler. On the minimal conductivity of graphene. *Phys. Rev. B*, 75:233407, 2007.
- [63] P. M. Ostrovsky, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin. Quantum criticality and minimal conductivity in graphene with long-range disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 98:256801, 2007.
- [64] P. M. Ostrovsky, I. V. Gornyi, and A. D. Mirlin. Conductivity of disordered graphene at half filling. 2007.
- [65] J. González, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano. Non-fermi liquid behavior of electrons in the half-filled honeycomb lattice. a renormalization group approach. *Nucl. Phys. B*, 424 [FS]:595, 1994.
- [66] S. Adam, E. H. Hwang, V. M. Galitski, and S. Das Sarma. A self-consistent theory for graphene transport. *arXiv0705.1540*, 2007.
- [67] Y.-W. Tan, Y. Zhang, K. Bolotin, Y. Zhao, S. Adam, E. H. Hwang, S. Das Sarma, H. L. Stormer, and P. Kim. Measurement of scattering rate and minimum conductivity in graphene. *arXiv0707.1807*, 2007.
- [68] V. V. Cheianov, V. I. Fal'ko, B. L. Altshuler, and I. L. Aleiner. Random resistor network model of minimal conductivity in graphene. *arXiv0706.2968*, 2007.
- [69] A. F. Morpurgo and F. Guinea. Intervalley scattering, long-range disorder, and effective time-reversal symmetry breaking in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 97:196804, 2006.
- [70] K. B. Efetov. Supersymmetry method in localisation theory. *Sov. Phys. JETP*, 55:514, 1982.
- [71] A. Kamenev. Many body theory of non-equilibrium systems. *Cond-mat/0412296*.

- [72] S. F. Edwards and P. W. Anderson. Theory of spin glasses. *J. Phys. F*, 5:965–974, 1975.
- [73] A. J. McKane and M. Stone. Localization as an alternative to the goldstone’s theorem. *Ann. of Phys.*, 131:36, 1981.
- [74] J. González, F. Guinea, and M. A. H. Vozmediano. Electron-electron interactions in graphene sheets. *Phys. Rev. B*, 63:134421, 2001.
- [75] A. Altland and B. Simons. *Condensed Matter Field Theory*. Cambridge University Press, 2006.
- [76] E. de Vries and A. J. van Zanten. The dirac matrix group and fierz transformations. *Commun. math. Phys.*, 17:322–342, 1970.
- [77] D. J. Gross and A. Neveu. Dynamical symmetry breaking in asymptotically free field theories. *Phys. Rev. D*, 10:3235, 1974.
- [78] A. Aronov, P. Wölfle, and A. D. Mirlin. Localization of charged quantum particles in a static random magnetic field. *Phys. Rev. B*, 49:16609, 1994.
- [79] Y. Nambu and G. Jona-Lasinio. *Phys. Rev.*, 122:345, 1961.
- [80] A. Altland. Low energy theory of disordered graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 97:236802, 2006.
- [81] S. Hikami. Anderson localization in a nonlinear σ model representation. *Phys. Rev. B*, 24:2671, 1981.
- [82] K. Nomura and A. H. MacDonald. Quantum transport of massless dirac fermions in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 96:256602, 2006.
- [83] S. Adam, E. H. Hwang, V. M. Galitski, and S. Das Sarma. A self-consistent theory for graphene transport. 2007.
- [84] Y.-W. Tan, Y. Zhang, K. Bolotin, Y. Zhao, S. Adam, E. H. Hwang, S. Das Sarma, H. L. Stormer, and P. Kim. Measurement of scattering rate and minimum conductivity in graphene. 2007.
- [85] N. M. R. Peres, F. Guinea, and A. H. Castro Neto. Electronic properties of disordered two-dimensional carbon. *Phys. Rev. B*, 73:125411, 2006.
- [86] O. Klein. *Z. Phys.*, 53:157, 1929.
- [87] B. Huard, J. A. Sulpizio, N. Stander, K. Todd, B. Yang, and D. Goldhaber-Gordon. Transport measurements across a tunable potential barrier in graphene. *cond-mat/arXiv:0704.2626*, 2007.

- [88] V. V. Cheianov and V. I. Falk'o. Selective transmission of dirac electrons and ballistic magnetoresistance of $n - p$ junctions in graphene. *Phys. Rev. B*, 74:041403(R), 2006.
- [89] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, Y. Zhang, S. V. Dubonos, I. V. Grigoreva, and A. A. Fisov. Electric field effect in atomically thin carbon films. *science*, 306:666–669, 2004.
- [90] H. B. Nielsen and M. Ninoyima. Absence of neutrinos on a lattice : (i). proof by homotopy theory. *Nuc. Phys. B*, 185:20, 1981.
- [91] H. B. Nielsen and M. Ninoyima. Absence of neutrinos on a lattice : (ii). intuitive topological proof. *Nuc. Phys. B*, 193:173, 1981.
- [92] S. V. Morozov, K. S. Novoselov, M. I. Katsnelson, F. Schedin, L. A. Ponomarenko, D. Jiang, and A. K. Geim. Strong suppression of weak localization in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 97:016801, 2006.
- [93] H. Kosaka, T. Kawashima, A. Tomita, M. Notomi, T. Tamamura, T. Sato, and S. Kawakami. Self-collimating phenomena in photonic crystals. *App. Phys. Lett.*, 74:1212, 1999.
- [94] J. L. Garcia-Pomar and M. Nieto-Vesperinas. Waveguiding, collimation and subwavelength concentration in photonic crystals. *Opt. Express*, 13:7997, 2005.
- [95] F.D.M. Haldane and S. Raghu. "one-way waveguides": Analogs of quantum hall edge-states in photonic crystals. *arXiv.org:cond-mat/0503588*, 1995.
- [96] F.D.M. Haldane and S. Raghu. Analogs of quantum hall effect edge states in photonic crystals. *arXiv.org:cond-mat/0602501*, 1996.
- [97] R. A. Sepkhanov, Ya. B. Bazaliy, and C. W. J. Beenakker. Extremal transmission at the dirac point of a photonic band structure. *Phys. Rev. A*, 75:063813, 2007.